

VŠB – Technická univerzita Ostrava

Fakulta strojní

Katedra hydromechaniky a hydraulických zařízení

Modelování dynamiky plamene

Modelling of Flame Dynamics

Student: Bc. Ondřej Štěpánek

Vedoucí práce: prof. RNDr. Milada Kozubková, CSc.

Ostrava 2012

Zadání diplomové práce

Student: **Bc. Ondřej Štěpánek**

Studijní program: N2301 Strojní inženýrství

Studijní obor: 3909T001 Konstrukční a procesní inženýrství

Specializace: 16 Hydraulické a pneumatické stroje a zařízení

Téma: **Modelování dynamiky plamene.**
Modelling of Flame Dynamics.

Zásady pro vypracování:

Simulujte dynamiku plamene při hoření methanu.

1. Definování matematického modelu hoření methanu při laminárním proudění.
2. Kinetická teorie plynů, definice fyzikálních a chemických vlastností složek při hoření methanu.
3. Popis experimentálního zařízení pro simulaci laminárního proudění při hoření methanu, metody vyhodnocování.
4. Vytvoření geometrie (2D resp. 3D), výpočet, vyhodnocení variant řešení, využití FFT pro stanovení dynamiky plamene.
5. Zhodnocení variant řešení a porovnání s experimentem.

Seznam doporučené odborné literatury:

DRÁBKOVÁ, Sylva a kol. *Mechanika tekutin*. Ostrava: VŠB-TU Ostrava, 2007. 248 s. (Elearningová učebnice). ISBN 978-80-248-1508-4.

INCROPERA, F. a kol. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. , 6. edition, John Wiley and Sons 2007, 996p., ISBN 978-0-471-45728-2

KOZUBKOVÁ, M.: *Modelování proudění tekutin FLUENT, CFX*. Ostrava: VŠB-TU, 2008, 115 s., ISBN 978-80-248-1913-6, (Elektronická publikace na CD ROM)

Ansys, Inc. *ANSYS FLUENT 13 - Theory Guide*. 2010.

Ansys, Inc. *ANSYS FLUENT 13 - User's Guide*. 2010.

Formální náležitosti a rozsah diplomové práce stanoví pokyny pro vypracování zveřejněné na webových stránkách fakulty.

Vedoucí diplomové práce: **prof. RNDr. Milada Kozubková, CSc.**

Datum zadání: 16.12.2011

Datum odevzdání: 21.05.2012



prof. RNDr. Milada Kozubková, CSc.
vedoucí katedry



prof. Ing. Radim Farana, CSc.
děkan fakulty

Místopřísežné prohlášení studenta

Prohlašuji, že jsem celou diplomovou práci včetně příloh vypracoval samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a uvedl jsem všechny použité podklady a literaturu.

V Ostravě 18.5.2012

.....
podpis studenta

Prohlašuji, že

- jsem byl seznámen s tím, že na moji diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., autorský zákon, zejména § 35 – užití díla v rámci občanských a náboženských obřadů, v rámci školních představení a užití díla školního a § 60 – školní dílo.
- беру на ве́домі, že Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava (dále jen „VŠB-TUO“) má právo nevýdělečně ke své vnitřní potřebě diplomovou práci užít (§ 35 odst. 3).
- souhlasím s tím, že diplomová práce bude v elektronické podobě uložena v Ústřední knihovně VŠB-TUO k nahlédnutí a jeden výtisk bude uložen u vedoucího diplomové práce. Souhlasím s tím, že údaje o kvalifikační práci budou zveřejněny v informačním systému VŠB-TUO.
- bylo sjednáno, že s VŠB-TUO, v případě zájmu z její strany, uzavřu licenční smlouvu s oprávněním užít dílo v rozsahu § 12 odst. 4 autorského zákona.
- bylo sjednáno, že užít své dílo – diplomovou práci nebo poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem VŠB-TUO, která je oprávněna v takovém případě ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které byly VŠB-TUO na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše).
- беру на ве́домі, že odevzdáním své práce souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších předpisů, bez ohledu na výsledek její obhajoby.

V Ostravě : 18.5.2012



.....
podpis

Jméno a příjmení autora práce:

Bc. Ondřej Štěpánek

Adresa trvalého pobytu autora práce:

Záfaří 394/4, Křelov, 783 36

ANOTACE DIPLOMOVÉ PRÁCE

ŠTĚPÁNEK, O. Modelování dynamiky plamene: *diplomová práce*. Ostrava : VŠB – Technická univerzita Ostrava, Fakulta strojní, Katedra hydromechaniky a hydraulických zařízení, 2012, 77 s. Vedoucí práce: Kozubková, M.

Diplomová práce se zabývá matematickým modelováním dynamiky plamene na základě čtyř předem vybraných chemických modelů spalování metanu a porovnáním vypočtených výsledků s laboratorním experimentem. Popisuje sestavení vhodného matematického modelu postupným získáváním okrajových podmínek měřením experimentu, tvorbu sítě, určení typu proudění z vypočtených dat, podrobné definování chemismů a konečně také zhodnocení získaných řešení.

ANNOTATION OF DIPLOMA THESIS

ŠTĚPÁNEK, O. Modelling of Flame Dynamics: *Diploma Thesis*. Ostrava : VŠB – Technical University of Ostrava, Faculty of Mechanical Engineering, Department of Hydromechanics and Hydraulic Equipment , 2012, 77 p. Thesis head: Kozubková, M.

Diploma thesis deals with the mathematical modeling of dynamics of flame through four chemical models of methane combustion and comparison these results with laboratory experiment. It describes the compilation of an appropriate mathematical model through the gradual acquisition of boundary conditions from the experiment, meshing, choosing the flow type from calculated data, detailed definition of chemistry, and finally evaluating obtained solutions.

Obsah

1	Úvod.....	12
2	Teorie spalování paliv.....	12
2.1	Spalování.....	12
2.2	Způsoby spalování.....	13
2.2.1	Dokonalé spalování	13
2.2.2	Nedokonalé spalování.....	13
3	Fyzikální principy přenosu hmoty, hybnosti a tepla	14
3.1	Konvektivní přenos.....	15
3.2	Difúzní přenos.....	16
3.3	Přenos energie, hmoty, hybnosti a tepla	17
3.4	Klasifikace proudění.....	18
3.5	Proudění příměsí	19
3.6	Kinetika plynů.....	20
3.7	Fyzikální vlastnosti plynného média	22
3.7.1	Ideální plyn	22
3.7.2	Viskozita	22
3.7.3	Měrné teplo.....	23
3.8	Fyzikální vlastnosti směsi.....	24
4	Chemismy	25
4.1	Chemický model Zambon-Chelliah (ZC).....	25
4.2	Chemický model Puri-Seshadri (PS)	25
4.3	Chemický model Andersen-et-al (WD)	26
4.4	Chemický model Bibrycki-Poinsot (CM)	27
5	Experimentální část	28
5.1	Popis experimentálního zařízení	28
5.2	Postup a vyhodnocení měření.....	31
5.3	Definování porézního prostředí	34
5.3.1	Darcyho vztah pro porézní prostředí	35
5.3.2	Porozita získaná měřením tlakového spádu.....	35

5.3.3	Porozita získaná poměrem objemů	37
6	Numerická část.....	38
6.1	Matematický model	38
6.2	Tvorba sítě	38
6.3	Okrajové podmínky a fyzikální vlastnosti	41
6.4	Využití FFT pro stanovení dynamiky plamene	44
6.5	Výsledky řešených úloh.....	44
6.6	Zhodnocení výsledků	52
7	Závěr.....	53
8	Literatura	56
9	Seznam příloh	58

Značka	Název veličiny	Jednotka
A_k	předexponenciální faktor	$[\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1}]$
α	permeabilita	$[\text{m}^2]$
β_k	teplotní exponent	[1]
c_p	měrná tepelná kapacita	$[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
c_j	molární koncentrace	$[\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}]$
C	molární koncentrace každého reaktantu	$[\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}]$
γ	porozita prostředí	[1]
d	průměr	[m]
d_h	hydraulický průměr	[m]
D	větší průměr	[m]
Δ	chyba měření	[1]
Δp	tlakový spád	[Pa]
$\Delta \eta$	tloušťka média	[m]
E_k	aktivační energie	$[\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1}]$
ξ	odpor třením	[1]
f	frekvence	[Hz]
g	gravitační zrychlení	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-2}]$
h	entalpie	$[\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1}]$
J	difúzní tok	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$
k	poměr objemových průtoků	[1]
l	délka	[m]
λ	součinitel tření	[1]
λ	tepelná vodivost	$[\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
m	hmotnost	[kg]
M	molární hmotnost	[kg/kmol]
\vec{n}	normálový vektor	[1]
N	počet příměsí	[1]
η'	rychlostní exponent	[1]
μ	dynamická viskozita	[Pa.s]
p	tlak	[Pa, bar]
π	Ludolfovo číslo	[1]
Q	teplo	[J]
Q_v	objemový průtok	$[\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$
Q_m	hmotnostní průtok	$[\text{kg}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$

r	měrná plynová konstanta	$[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
R	universální plynová konstanta	$[\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
Re	Reynoldsovo číslo	[1]
Ri'	zdrojový člen pro příměs i'	[1]
ρ	měrná hustota	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
Γ	celková účinnost	[1]
s	entropie	$[\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
S	plocha	$[\text{m}^2]$
σ	charakteristická délka	$[\text{°A}]$
t	čas	[s]
\vec{u}	hustota toku	[1]
ν'	stechiometrický koeficient	[1]
V	objem	$[\text{m}^3]$
v_s	střední rychlost	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$
ν	kinematická viskozita	$[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$
Y	hmotnostní zlomek	[1]
Ω	funkce závislosti na teplotě	[1]

Přehled použitých zkratk

CM	Chemický model Bibrzycki-Poinsot
FBI	Fakulta bezpečnostního inženýrství
MEC	Minimální hasící koncentrace (Minimum Extinguishing Concetration)
PS	Chemický model Puri-Seshadri
WD	Chemický model Andersen-et-al
ZC	Chemický model Zambon-Chelliah
L-J	Lennard-Jonesovy parametry
FFT	Rychlá Fourierova transformace

1 Úvod

Téma této práce bylo sestaveno v rámci projektu COST s názvem *Detailní chemické kinetické modely pro čistší spalování*, který je řešen ve spolupráci s fakultou bezpečnostního inženýrství (FBI) při VŠB-TUO. Konkrétní zadání pro naši katedru zní – *Kombinované modely kinetických chemismů a simulace dynamiky proudění pro procesy čistšího spalování*.

K současným požárními detektorům, jejichž součástí běžně bývá pouze varovná kouřová signalizace, se do budoucna budou instalovat speciální kamery. Tyto budou mít dvě základní funkce. Pomocí spektrální analýzy plamene rozpoznat rozsah požáru a adekvátně reagovat dle konkrétní situace. A to buď dávkováním hasiva, což je část projektu, kterou má na starost FBI - řešení chemismů. Nebo pokud bude požár natolik rozsáhlý, že systém nebude schopný jej svépomocí uhasit, přivolat konkrétní počet záchranných požárních jednotek.

Část řešená naší katedrou se tedy týká měření a matematického modelování chování plamene. A to konkrétně při spalování metanu.

2 Teorie spalování paliv

2.1 Spalování

Spalování je chemický pochod, při kterém se mění chemická energie v energii tepelnou o vysokém teplotním potenciálu. V technické praxi se pokládá za spalování rychlá oxidace paliva (hoření). Hoření tvoří souhrn exotermických reakcí složek paliva a okysličovadla za vzniku produktu spalovacího pochodu, probíhajících s intenzivním uvolňováním tepla a prudkým stoupáním teploty reagující směsi. Může nastat samovolným vznícením nebo působením vnějšího impulsu. Potřebný kyslík ke spalování se dodává ze vzduchu. Základní používané pojmy při hoření jsou:

Palivo - hořlavá látka s dostatečnou výhřevností (často je organického původu)

Okysličovadlo - látka obsahující kyslík

Produkty spalovacího pochodu – látky, jež jsou výsledkem chemické reakce mezi palivem a okysličovadlem

zápalná teplota - teplota, při které stoupne reakční rychlost na takovou hodnotu, že reakcí uvolněné teplo je větší, než teplo odevzdané do okolí

Pro zajištění rychlé oxidace je třeba zajistit:

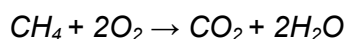
- dobré promíchání paliva s okysličovadlem
- zahřátí směsi na zápalnou teplotu

2.2 Způsoby spalování

2.2.1 Dokonalé spalování

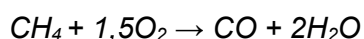
Spalování, při kterém nastane spálení všech hořlavých složek v palivu, takže ve vzniklých spalínách nejsou již obsaženy, veškerá hořlavina v palivu se přemění na plynnou fázi. Dokonalého spalování lze při dokonalém promísení paliva se vzduchem a při ideálních spalovacích podmínkách dosáhnout teoretickým množstvím vzduchu (O_2). V praxi je pro dokonalé spalování zapotřebí vyšší množství kyslíku. Množství závisí na druhu paliva, vzájemném promísení a oblasti spalování. Za hranici dokonalosti spalování je považována hodnota nedopalu v tuhých zbytcích po spalování do 5% [14].

Jednoduchý příklad pro spalování metanu CH_4



2.2.2 Nedokonalé spalování

Spalování, při kterém část paliva uhlíku shoří nedokonale na CO a část eventuálně vůbec.



Ke spalování se používá atmosférický vzduch (složení 21% O_2 , 78% N_2 , 1% vzácné plyny), procentuální podíl lze vyjádřit hmotnostním zlomkem $Y_{O_2}=0,21$,

$Y_{N_2}=0,78$. Důležitým faktorem procesu je zajištění potřebného množství vzduchu k dokonalému spalování. Součinitel přebytku vzduchu α charakterizuje vztah mezi skutečným množstvím vzduchu (O_2) a teoretickým (minimálním) množstvím:

$$\alpha = \frac{V_s}{V_t} = \frac{O_{2s}}{O_{2t}} \quad (2.1)$$

V_s	$[m^3]$	skutečné množství vzduchu
V_t	$[m^3]$	teoretické množství vzduchu
O_{2s}	$[m^3]$	skutečné množství kyslíku
O_{2t}	$[m^3]$	teoretické množství kyslíku

Při $\alpha < 1$ se jedná o tzv. pod-stechiometrické spalování, kdy přivedené množství vzduchu nestačí na převedení veškeré hořlaviny do plynného stavu. V případě, že $\alpha = 1$, se jedná o ideální podmínky, kdy je palivu přivedeno stejné množství vzduchu, jaké je potřeba na dokonalé vyhoření paliva – stechiometrické spalování. Pro $\alpha > 1$ se ve spalínách objeví kyslík, který nestihl zreagovat – nad-stechiometrické spalování. Nedokonalé spalování zhoršuje tepelnou účinnost spalování a je nežádoucí [14].

3 Fyzikální principy přenosu hmoty, hybnosti a tepla

Aby bylo možno počítat přenos hmoty, hybnosti, energie a dalších vlastností a látek plochou, je třeba rozlišovat pohyb tekutiny na úrovni různých délkových měřítek – *makroskopická měřítká* (částice) a *mikroskopická měřítká* (molekuly).

Při makroskopickém Eulerovském přístupu je, dle [7], nutno určit pole rychlosti. Přenos částic tekutiny přes plochu se nazývá *konvektivní přenos*. Přenos, který je definován na úrovni molekul se nazývá *difúzní přenos*.

Konvektivní přenos je nulový, pokud se tekutina nepohybuje, difúzní transport může být nenulový i v klidu, např. existence teplotního gradientu je dána difúzním transportem tepla. Při proudění tekutiny jsou přítomny oba přenosy, ale jeden z nich může významně převyšovat druhý. Např. při turbulentním proudění konvektivní přenos hmoty, hybnosti a energie může být překvapivě velký. Plocha, přes kterou probíhá přenos, může být skutečná stěna ohraničující objem tekutiny, nebo fiktivní, umístěná uvnitř tekutiny. [7]

3.1 Konvektivní přenos

Přenos Γ_K v určitém bodě průtočné plochy je definován rychlostí, kterou je daná veličina přenášena přes plochu S , v diferenciálním tvaru je definován:

$$d\Gamma_K = \zeta(\vec{u} \cdot \vec{n})dS \quad (3.1)$$

kde ζ obecná veličina (skalár)
 dS velikost elementu plochy
 \vec{n} normálový vektor k elementu plochy dS
 $\zeta\vec{u}$ hustota toku veličiny ζ

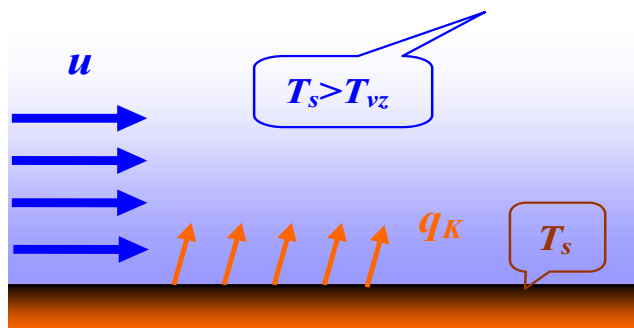
tepelný tok bude obecně definován jako

$$\Gamma_K = \int_S h(\vec{u} \cdot \vec{n}) dS \quad (3.2)$$

Významnou úlohou při přenosu tekutiny je určení toku hybnosti, tj. toku vektoru rychlosti plochou, který je definován jako

$$\vec{\Gamma}_K = \int_S \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{n}) dS \quad (3.3)$$

V každém bodě plochy má konvektivní přenos jinou hodnotu.



obr. 1 Přenos tepla konvekcí [7]

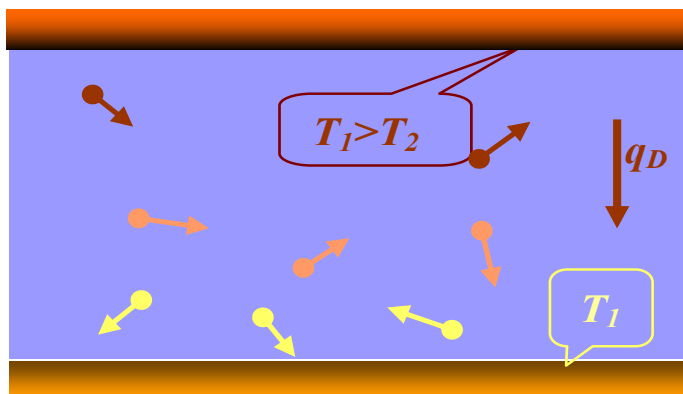
3.2 Difúzní přenos

Difúzní přenos, dle [7], vzniká z mikroskopického pohybu molekul, závisí na orientaci a tvaru plochy a na rozložení vlastnosti v daném bodě. Je užitečné definovat difúzní tok přenosu v daném bodě, který má rozměr transportované veličiny jednotkou plochy za jednotku času. Pro tekutiny jako je vzduch a voda, je vztah mezi tokem a gradientem transportované veličiny modelován lineární závislostí, která je dostatečně přesná pro inženýrské aplikace. Při určování vedení tepla dle Fourierova zákona je např. hustota tepelného toku vektor (3.4). Podobně je tomu pro koncentrace.

$$\vec{q}_D = -\lambda \nabla T \quad (3.4)$$

Difúzní přenos tepla je analogicky k celkovému konvektivnímu přenosu dán plošným integrálem

$$\Gamma_D = \int_S (\vec{q}_D \cdot \vec{n}) dS \quad (3.5)$$



obr. 2 Přenos tepla difúzí [7]

3.3 Přenos energie, hmoty, hybnosti a tepla

Celkový přenos je pak vyjádřen součtem konvektivního a difúzního přenosu

$$\Gamma = \Gamma_K + \Gamma_D \quad (3.6)$$

Základní fyzikální zákony popisující přenos hmoty, hybnosti a tepla (tj. proudění) jsou zákony zachování hmotnosti, hybnosti, tepla. Jsou vyjádřeny Navier-Stokesovými rovnicemi spolu s rovnicí kontinuity a energie a popisují laminární i turbulentní neizotermní proudění stlačitelné tekutiny.

Rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3.7)$$

kde ρ je měrná hustota, u_j složka rychlosti a x_j souřadnice v souřadném systému

Navier-Stokesova rovnice:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \rho \delta_i g + \rho f_c \varepsilon_{ij} u_j + \rho f_i \quad (3.8)$$

kde p je hydrostatický tlak, g je gravitační zrychlení, μ viskozita, δ_i složka jednotkového tenzoru, ε_{ij} rychlost disipace a f_c je odstředivá síla.

Rovnice energie:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{dp}{dt} + \frac{\partial(\tau_{j,k} u_j)}{\partial x_k} \quad (3.9)$$

kde h je entalpie, λ molekulová tepelná vodivost a $\tau_{j,k}$ tenzor napětí

Entalpie:

V rovnici energie se vyskytuje entalpie, která vyjadřuje energii uloženou v termodynamickém systému [13]. Jedná se o jeden ze čtyř základních termodynamických potenciálů. Entalpie je extenzivní termodynamická veličina – závisí na velikosti systému. Její absolutní hodnotu nelze změřit, stanovuje se jen

změna entalpie Δh vztažená na dohodnutý (standardní) stav, kterému odpovídá teplota 0,01 °C a tlak 101325 Pa.

$$h = \int_{T_{ref}}^T c_p dT \quad (3.10)$$

Entropie:

Je definována jako míra neurčitosti systému [15]. Entropie je veličina s velkým významem, neboť umožňuje formulovat druhou hlavní větu termodynamiky, a vyjádřit kvantitativně nevratnost tepelných pochodů.

$$s = \int_0^T \frac{c_p}{T} dT - \int_0^{T_{ref}} \frac{c_p}{T} dT \quad (3.11)$$

3.4 Klasifikace proudění

Proudění skutečných tekutin může být klasifikováno jako *laminární* nebo *turbulentní* proudění. Turbulentní proudění je takové proudění viskózní tekutiny, při kterém se proudnice navzájem promíchávají. Částice tekutiny vykonávají při proudění kromě posouvání i složitý vlastní pohyb, který vede ke vzniku vírů. Rychlosti jednotlivých částic tekutiny se nepravidelně mění, takže částice již nemají ve všech místech neměnnou rychlost, proudění tedy není stacionární [1].

U turbulentního proudění bylo na základě experimentálních měření zjištěno, že na stěnách potrubí nebo obtékaného tělesa vzniká vrstva kapaliny s laminárním pohybem, tzv. *laminární podvrstva*, jejíž tloušťka je několik desetin milimetrů. Těsně za laminární podvrstvou je *přechodová vrstva* mezi laminární podvrstvou a *turbulentním jádrem*, které tvoří další oblast turbulentního proudu. Laminární podvrstva a přechodová vrstva tvoří turbulentní mezní vrstvu.

Pro stanovení typu proudění je třeba určit tzv. Reynoldsovo číslo. Což je bezrozměrná veličina, která dává do souvislosti setrvačné síly se silami viskozními. Pomocí něj je možné určit, zda je proudění tekutiny laminární, nebo turbulentní. Čím je hodnota Reynoldsova čísla vyšší, tím nižší je vliv třecích sil částic tekutiny na celkový odpor [1].

V případě jednorozměrného proudění v potrubí je přechod k turbulenci dán experimentálně určeným *kritickým Reynoldsovým číslem* Re , které je definováno vztahem (3.5).

Kritická hodnota Reynoldsova čísla pro potrubí kruhového průřezu je 2320. Při $Re < Re_{krit}$ se v potrubí vyvine uspořádané laminární proudění, pohyb se děje ve vrstvách a částice tekutiny se nepohybují napříč průřezem. Je-li $Re > Re_{krit}$, proudění je turbulentní.

$$Re_{krit} = \frac{v_s \cdot d_h}{\nu} \quad (3.12)$$

3.5 Proudění příměsí

Matematický model je dán rovnicí kontinuity, pohybovou rovnicí, rovnicí energie pro směs a navíc počítá lokální hmotnostní zlomky příměsí Y_i . Hmotnostní zlomek příměsí je definován vztahem:

$$Y_{i'} = \frac{m_{i'}}{m} = \frac{\rho_{i'} \cdot V_{i'}}{\rho V} = \frac{\rho_{i'}}{\rho} \alpha_{i'} \quad (3.13)$$

kde:	$m_{i'}$ [kg]	hmotnost příměsí i'
	m [kg]	celková hmotnost směsi
	$Y_{i'}$ [1]	hmotnostní zlomek příměsí i' ve směsi
	$\alpha_{i'}$ [1]	objemový zlomek příměsí i' ve směsi
	$V_{i'}$ [m ³]	objem příměsí i'
	V [m ³]	celkový objem

Lokální hmotnostní zlomky příměsí Y_i jsou popsány podobnou bilanční rovnicí zahrnující konvektivní a difúzní složky přenosu. Je využíváno vztahu [12], jež má v konzervativní formě tvar

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{i'}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j Y_{i'}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} J_{j,i'} + R_{i'} + S_{i'} \quad (3.14)$$

kde u_i časově středovaná složka rychlosti proudění
 $R_{i'}$ rychlost produkce příměsí i' vlivem chemické reakce
 $S_{i'}$ rychlost tvorby přírůstku z distribuované příměsí
 $J_{j,i'}$ difúzní tok i' -té složky směsi, který je definován vztahem:

$$J_{j,i'} = -\rho D_{i',m} \frac{\partial Y_{i'}}{\partial x_j} \quad (3.15)$$

kde $D_{i',m}$ je difúzní koeficient i' -té příměsí ve směsi.

Zdrojový člen $R_{i'}$ z důvodu chemické reakce v rovnici pro příměs i' je počítán jako součet reakčních zdrojových členů příměsí, které se na reakci podílejí:

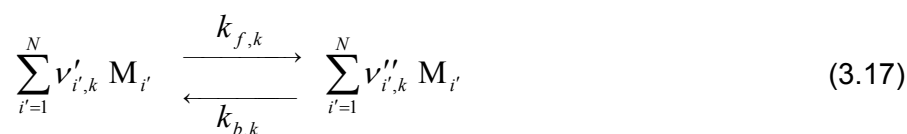
$$R_{i'} = M_{i'} \sum_{k=1}^{N_R} R_{i',k} \quad (3.16)$$

kde $R_{i',k}$ se vyjádří pomocí kinetiky plynů.

3.6 Kinetika plynů

Pro řešení hmotnostních zlomků transportních rovnic chemických reakcí využijí Arrheniových vztahů. Arrheniova rovnice vyjadřuje rychlost chemické reakce. Vkládá se do zdrojových členů v každé rovnici těch kterých příměsí. Modely tohoto typu jsou dle [5] vhodné pro široký okruh aplikací včetně modelu spalování s nepromíchanými plyny, promíchanými plyny, částečně promíchanými plyny, reakcí na povrchu stěn nebo hmotných částic.

Budeme-li uvažovat k -tou reakci zapsanou v obecném tvaru jako:



kde N počet chemických příměsí
 $\nu'_{i',k}$ stechiometrický koeficient pro reaktant i' v k -té reakci

- $\nu''_{i',k}$ stechiometrický koeficient pro produkt i' v k -té reakci
- $M_{i'}$ symbol označující molovou hmotnost příměsi i'
- $k_{f,k}$ rychlostní konstanta pro k -tou přímou (dopřednou) reakci
- $k_{b,k}$ rychlostní konstanta pro k -tou zpětnou reakci

Rovnice platí pro oba směry chemické reakce. Sumační rovnice platí pro všechny chemické příměsi v systému, ale pouze příměsi objevující se v reakci mají nenulové stechiometrické koeficienty. Molární poměr je dán vztahem [5]:

$$R_{i',k} = \Gamma (\nu''_{i',k} - \nu'_{i',k}) \left(k_{f,k} \prod_{j'=1}^N [C_{j'}]^{\eta'_{j',k}} - k_{b,k} \prod_{j'=1}^N [C_{j'}]^{\eta''_{j',k}} \right) \quad (3.18)$$

- kde $C_{j'}$ molární koncentrace každého reaktantu příměsi j'
- $\eta'_{j',k}$ rychlostní exponent dopředné reakce
- $\eta''_{j',k}$ rychlostní exponent zpětné reakce
- Γ celková účinnost třetího řádu na reakci

$$\Gamma = \sum_{j'}^N \gamma_{j'k} C_{j'} \quad (3.19)$$

Γ je účinnost třetího rozměru j' -té příměsi v k -té reakci, $\gamma_{j'k}$

Konstanta k -té přímé reakce $k_{f,k}$ je počítána užitím Arrheniovy rovnice [5]:

$$k_{f,k} = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (3.20)$$

- kde A_k před-exponenciální faktor
- β_k teplotní exponent
- E_k aktivační energie reakce
- R univerzální plynová konstanta

3.7 Fyzikální vlastnosti plynného média

Fyzikální veličiny se definují v závislosti na teplotě experimentálně zjištěnými závislostmi, jako polynom, tabulka, atd. Podle kinetické energie ideálního plynu mohou být definovány následující fyzikální vlastnosti a parametry [7]:

- hustota
- viskozita
- tepelná vodivost
- měrná tepelná kapacita
- koeficienty difúze hmoty (pro multi-speciální druhy směsi)

3.7.1 Ideální plyn

Ideální (dokonalý) plyn je plyn, který má na rozdíl od skutečného plynu tyto ideální vlastnosti:

- je dokonale stlačitelný a bez vnitřního tření.
- rozměry částic jsou zanedbatelné vzhledem ke vzdálenostem mezi nimi (částice ideálního plynu lze tedy považovat za hmotné body),
- kromě srážek na sebe částice jinak nepůsobí,
- celková kinetická energie částic se při vzájemných srážkách nemění - srážky částic jsou dokonale pružné.

Důsledkem těchto podmínek je dokonalá stlačitelnost a dokonalá tekutost ideálního plynu:

$$\rho = \frac{p}{r \cdot T} \quad (3.21)$$

3.7.2 Viskozita

Definice dynamické viskozity μ při užití kinetické teorie je následující [7]:

$$\mu = 2.67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{MT}}{\sigma^2 \Omega_\mu} \quad (3.22)$$

kde:

$$\Omega_\mu = \Omega_\mu(T^*) \quad (3.23)$$

$$T^* = \frac{T}{(\varepsilon / k_B)} \quad (3.24)$$

Lennard-Jonesovy parametry, které se v rov. 3.23 vyskytují ve jmenovateli jako ε / k_B , blíže specifikují kinetickou teorii daného materiálu. Jsou definovány pomocí charakteristické délky (σ [Å] - angstrom) a parametru energie (ε/k_B [K]) a jsou různé každý materiál nebo prvek.

Funkce Ω_μ je experimentálně určenou závislostí na bezrozměrné teplotě, např. [7]:

$$\Omega_\mu = \frac{1.16145}{(T^*)^{0.14874}} + \frac{0.52487}{\exp(0.77320T^*)} + \frac{2.16178}{\exp(2.43787T^*)} \quad (3.25)$$

3.7.3 Měrné teplo

Vzorec pro měrnou tepelnou kapacitu c_p při užití kinetické teorie je [7]:

$$c_p = \frac{R}{M}(f + 2) \quad (3.26)$$

kde f je počet modů energie (počet stupňů volnosti). Toto vyjádření je méně obvyklé, obvykle se používá spíše zápis pomocí polynomu pátého stupně:

$$c_p = Ra_1 + Ra_2 \cdot T + Ra_3 \cdot T^2 + Ra_4 \cdot T^3 + Ra_5 \cdot T^4 \quad (3.27)$$

kde a_n jsou termodynamické koeficienty určené pro konkrétní prvek, které jsou odlišné pro různá rozmezí teplot (viz tab. 3 v kapitole 6.3). R je universální plynová konstanta a T termodynamická teplota.

Tepelná vodivost λ při užití kinetické teorie je vyjádřena takto [7]:

$$\lambda = \frac{15}{4} \frac{R}{M} \mu \left[\frac{4}{15} \frac{c_p M}{R} + \frac{1}{3} \right] \quad (3.28)$$

Pozn.: Často se používá definice měrné tepelné kapacity pomocí polynomu. Software Cantera používá právě pouze polynomičké vyjádření, kdežto Fluent integrální vyjádření. Proto bylo nutné ověřit, shodují-li se matematické postupy obou výpočtových softwarů. Odvození se nachází v *příloze D* (pro entalpii) a *E* (pro entropii). Výsledky byly konfrontovány s jedno-rozměrným modelem.

3.8 Fyzikální vlastnosti směsi

Integrální vyjádření použitých vlastností směsí plynů ve Fluentu [5]:

Hustota:

$$\rho = \frac{p_{op} + p}{RT \sum_{i'} \frac{Y_{i'}}{M_{i'}}} \quad (3.29)$$

Kinematická viskozita:

$$\mu = \frac{\sum_{i'} X_{i'} \cdot \mu_{i'}}{\sum_{j'} X_{j'} \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_{j'}}{\mu_{i'}} \right)^{1/2} \cdot \left(\frac{M_{j'}}{M_{i'}} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \cdot \left(1 + \frac{M_{j'}}{M_{i'}} \right) \right]^{1/2}}} \quad (3.30)$$

Tepelná vodivost:

$$\lambda = \frac{\sum_{i'} X_{i'} \cdot \lambda_{i'}}{\sum_{j'} X_{j'} \frac{\left[1 + \left(\frac{\lambda_{j'}}{\lambda_{i'}} \right)^{1/2} \cdot \left(\frac{M_{j'}}{M_{i'}} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \cdot \left(1 + \frac{M_{j'}}{M_{i'}} \right) \right]^{1/2}}} \quad (3.31)$$

Měrná tepelná kapacita:

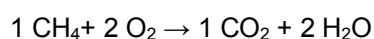
$$c_p = \sum_{i'} Y_{i'} c_{p,i'} \quad (3.32)$$

4 Chemismy

Pro tento případ byly podle literatury z FBI [4] vybrány čtyři chemické modely spalování metanu. Dva jedno-rovnicové a dva dvou-rovnicové modely. Všechna dodaná data byla v soustavě jednotek CGS, o které je blíže pojednáno v kapitole 5.2.1.

4.1 Chemický model Zambon-Chelliah (ZC)

Jedná se o jedno-rovnicový model, který je popsán rovnicí:



Rychlostní exponent reakce CH₄: 1

Rychlostní exponent reakce O₂: 2

Rychlostní exponent reakce CO₂: 0

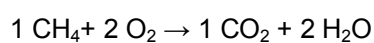
Rychlostní exponent reakce H₂O: 0

Před-exponenciální faktor: $1,35 \cdot 10^{20} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Aktivační energie: $3 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$

4.2 Chemický model Puri-Seshadri (PS)

Jedná se o jedno-rovnicový model se zvýšenými parametry, který je popsán rovnicí:



Rychlostní exponent reakce CH₄: 1

Rychlostní exponent reakce O₂: 2

Rychlostní exponent reakce CO₂: 0

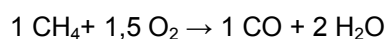
Rychlostní exponent reakce H_2O : 0

Před-exponenciální faktor: $8,9 \cdot 10^{18} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Aktivační energie: $4,5 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$

4.3 Chemický model Andersen-et-al (WD)

Jedná se o dvou-rovnicový model, který je popsán rovnicemi:



Rychlostní exponent reakce CH_4 : 0,7

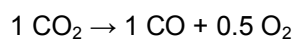
Rychlostní exponent reakce O_2 : 0,8

Rychlostní exponent reakce CO : 0

Rychlostní exponent reakce H_2O : 0

Před-exponenciální faktor: $1,58 \cdot 10^{13} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Aktivační energie: $4,78 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$



Rychlostní exponent reakce CO_2 : 1

Rychlostní exponent reakce CO : 0

Rychlostní exponent reakce O_2 : 0

Před-exponenciální faktor: $5 \cdot 10^8 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Aktivační energie: $4,07 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$



Rychlostní exponent reakce CO : 1

Rychlostní exponent reakce O_2 : 0,25

Rychlostní exponent reakce CO_2 : 0

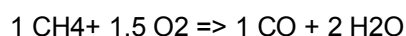
Rychlostní exponent reakce H_2O : 0,5

Před-exponenciální faktor: $3,98 \cdot 10^{14} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Aktivační energie: $4,07 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$

4.4 Chemický model Bibrycki-Poinsot (CM)

Jedná se o dvou-rovnicový model, který je popsán rovnicí:



Rychlostní exponent reakce CH_4 : 0,9

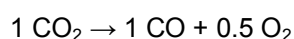
Rychlostní exponent reakce O_2 : 1,1

Rychlostní exponent reakce CO : 0

Rychlostní exponent reakce H_2O : 0

Před-exponenciální faktor: $2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Aktivační energie: $3,5 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$



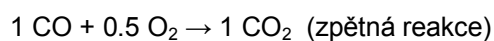
Rychlostní exponent reakce CO_2 : 1

Rychlostní exponent reakce CO : 0

Rychlostní exponent reakce O_2 : 0

Před-exponenciální faktor: $8,11 \cdot 10^{10} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Aktivační energie: $7,72 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$



Rychlostní exponent reakce CO : 1

Rychlostní exponent reakce O_2 : 0,5

Rychlostní exponent reakce CO_2 : 0

Rychlostní exponent reakce H_2O : 0

Před-exponenciální faktor: $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

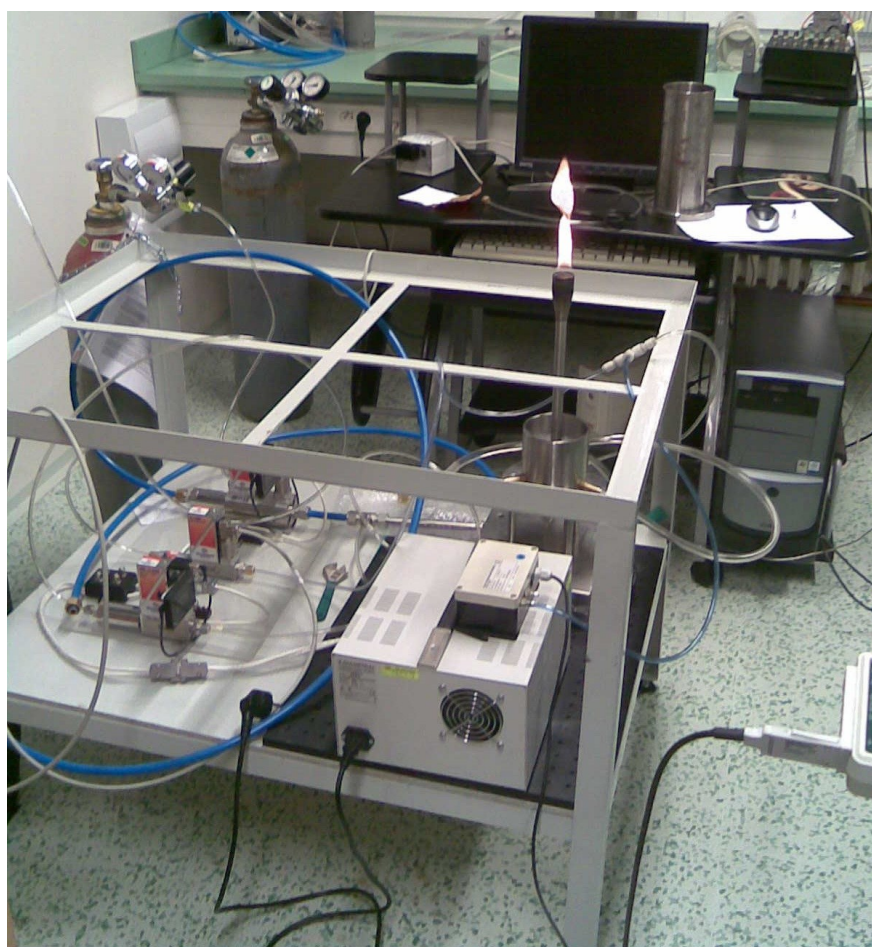
Aktivační energie: $1,2 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$

5 Experimentální část

5.1 Popis experimentálního zařízení

Experimentální zařízení bylo sestaveno na FBI za účelem sledování hoření metanu při laminárních podmínkách proudění, obr. 6 (příloha B, C), pracuje tedy v laminárním režimu. Dalším požadavkem na návrh a realizaci experimentální sestavy bylo měření parametrů plamene, které jsou významné z pohledu návrhu a testování metod optické detekce požárů (hlásiče vyzařování plamene, video detekce požáru) v laboratorním měřítku. [11]

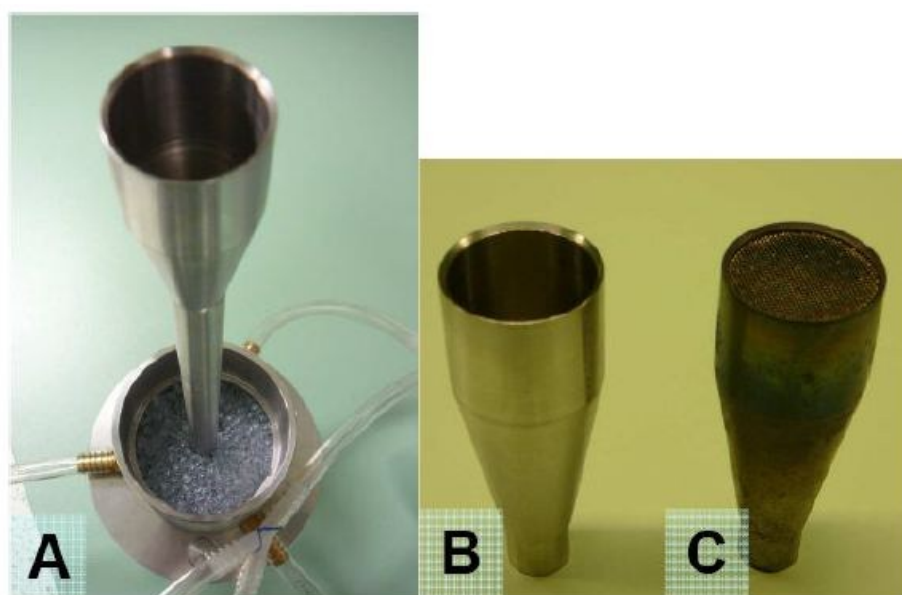
Cílem laboratorního experimentu, který je instalován v laboratoři fakulty bezpečnostního inženýrství, bylo získat sérii dat, která jsou určující pro stanovení vstupních okrajových podmínek matematického modelu, také však pro porovnání výsledků. Tato data jsou uvedena v *příloze A*.



obr. 3 Fotografie experimentálního zařízení v provozu

Experimentální zařízení bylo sestaveno na základě následujících požadavků:

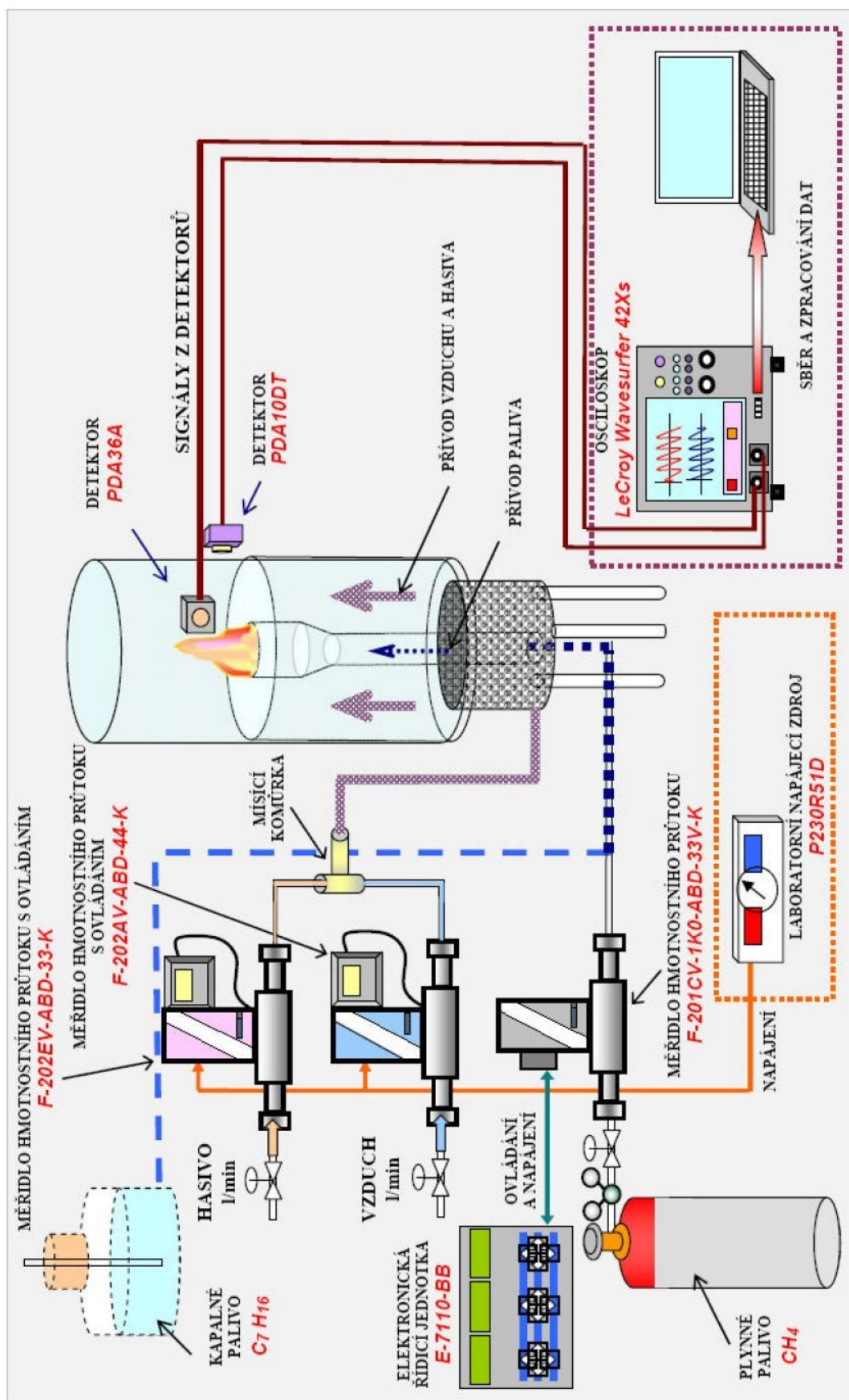
- Musí umožňovat studium nepředmíseného (difúzního) plamene.
- Hořák musí vycházet ze standardů užívaných ve vědecké komunitě viz obr. 4A (dle ISO 14 520-1 a NFPA 2001).
- Sestava musí umožňovat nezávislou kontinuální regulaci průtoku tekutin.
- Sestava musí umožnit realizaci optických měření.
- Hořák musí umožnit použití různých typů paliv (kapalná – obr. 4B i plynná – obr. 4C).
- Sestava musí eliminovat vliv okolního prostředí (proudění a přisávání vzduchu) i vliv proudění směsi vzduchu a hasící látky na strukturu plamene.



obr. 4 Detail konstrukce difuzoru a pohárků [11]

Experimentální sestavu lze rozdělit na tři základní části (viz obr. 3):

1. Modifikovaný pohárkový hořák poskytující nepředmísený plamen.
2. Systém přívodu paliva, vzduchu a hasící látky s možností monitorování.
3. Systém snímání signálů z plamene a jeho záznam dle potřeby.



obr. 5 Schéma experimentu [11]



obr. 6 Sekvence snímků plamene metanu při $v=1,5$ cm/s, $Q_{v,CH_4}=40$ dm³/min při různých koncentracích MEC hodnoty hasící koncentrace Ar [11]

5.2 Postup a vyhodnocení měření

Pro získání vstupních dat matematického modelu a okrajových podmínek, bylo nutné změřit alespoň tlak plynu na vstupu do pohárkového hořáku. Tlakový spád mezi vstupem do hořáku a výstupem z něj byl modifikován porézním prostředím v podobě skleněných kuliček, viz kapitola 5.3.

Na řídicí jednotce byl postupně zvyšován objemový průtok vzduchu od 100 ml/min až po 1000 ml/min s konstantním krokem 100 ml/min a měřen tlak na vstupu do pohárku. K dispozici byly také etalonové hodnoty rychlosti vzduchu při objemovém průtoku pro hodnoty 478, 598 a 718 ml/min, které posloužily jako kontrola naměřených hodnot.

Komplikace při výpočtu dat spočívala v tom, že byl měřen průtok vzduchu, ze kterého bylo nutné přepočtem určit výstupní rychlost metanu – průtokoměry byly cejchovány na proudění vzduchu. Na oceňovaných průtokoměrech byly určeny tři hodnoty průtoku vzduchu (viz výše), pro které byly dodány odpovídající rychlosti metanu (1, 1,25 a 1,5 cm/s). Na základě těchto šesti hodnot bylo nutné zjistit spojitost mezi průtokem vzduchu a rychlostí metanu při tomto průtoku. Takto naměřená a vypočtená data jsou v příloze A.

Všechna měřící zařízení v sestavě však pracovala se soustavou jednotek CGS. Systém jednotek CGS (centimetr, gram, sekunda),

též absolutní systém jednotek, představuje starší systém jednotek, používaný v letech 1874-1889. Pro různé obory existovaly různé modifikace této soustavy. Systém CGS byl v roce 1889 nahrazen soustavou *MKS* (metr, kilogram, sekunda), která byla roku 1960 nahrazena současnou soustavou *SI* [12]. Programový systém Fluent je schopný přepočítávat mezi soustavami CGS a *SI*. Pro měření tlaku byl použit průtokoměr, který měl pro toto konkrétní měření korekční odchylku -37,7 Pa.

Příklad výpočtu hodnot pro poslední řádek tabulky:

Dáno:

Změřený objemový průtok vzduchu	$Q_{VZ} = 478 \text{ ml/min} = 7,9667 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$,
Změřený tlak na vstupu do hořáku	$p = -24,1 \text{ Pa}$,
Chyba měření tlakoměru	$\Delta = -37,7 \text{ Pa}$,
Výstupní průměr hořáku	$D = 28 \text{ mm} = 0,028 \text{ m}$,
Kinematická viskozita metanu	$\nu_{CH_4} = 1,536 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$,
Dynamická viskozita metanu	$\eta_{CH_4} = 1,026 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$,
Měrná hustota metanu	$\rho_{CH_4} = 0,6679 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$,
Délka části hořáku s kuličkami	$l = 25 \text{ mm} = 0,025 \text{ m}$.

1. Výpočet skutečného tlaku:

$$p_{sk} = p - \Delta = -24,1 - (-37,7) = 13,6 \text{ Pa} \quad (5.1)$$

2. Stanovení poměru objemových průtoků:

$$k = \frac{Q_{VZ}}{Q_{CH_4}} = \frac{7,9667 \cdot 10^{-6}}{6,2013 \cdot 10^{-6}} = 1,28468654 [1] \quad (5.2)$$

3. Objemový průtok metanu:

$$Q_{CH_4} = \frac{Q_{VZ}}{k} = \frac{7,9667 \cdot 10^{-6}}{1,28468654} = 6,2013 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1} \quad (5.3)$$

4. Průtočná plocha:

$$S = \frac{\pi \cdot D^2}{4} = \frac{\pi \cdot 0,028^2}{4} = 6,1575 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \quad (5.4)$$

5. Rychlost proudění metanu:

$$v_{CH_4} = \frac{Q_{CH_4}}{S} = \frac{6,2013 \cdot 10^{-6}}{6,1575 \cdot 10^{-4}} = 0,01007102 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad (5.5)$$

6. Stanovení Reynoldsova čísla:

$$Re = \frac{v_{CH_4} \cdot D}{\nu_{CH_4}} = \frac{0,01007102 \cdot 0,028}{1,536 \cdot 10^{-5}} = 18,35674 [1] \quad (5.6)$$

7. Stanovení součinitele tření:

$$\lambda = \frac{64}{Re} = \frac{64}{18,35674} = 3,48645714 [1] \quad (5.7)$$

8. Odpor třením:

$$\xi = \frac{\lambda \cdot l}{D} = \frac{3,48645714 \cdot 0,025}{0,028} = 3,11290816 [1] \quad (5.8)$$

9. Tlakový spád v důsledku tření na hořáku:

$$\Delta p = \frac{\rho \cdot \xi \cdot v_{CH_4}^2}{2} = \frac{0,6679 \cdot 3,11290816 \cdot 0,01007102^2}{2} = 1,05 \cdot 10^{-4} \text{ Pa} \quad (5.9)$$

Hodnota tlakového spádu je platná pro vstup do hořáku. Jeho hodnota dále rostla, protože porézní prostředí na konci hořáku představovalo odpor.

10. Hmotnostní průtok metanu:

$$Q_{m\ CH_4} = \rho \cdot Q_{CH_4} = 0,6679 \cdot 6,2013 \cdot 10^{-6} = 4,14182 \cdot 10^{-6} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \quad (5.10)$$

5.3 Definování porézního prostředí

Difuzor byl v souladu s ISO 14 520 - 1 a NFPA 2001 vyplněn vrstvou skleněných kuliček o průměru 3 mm (výška vrstvy 25 mm), které byly položeny na vrstvě drátěného síta z nerezové oceli s velikostí oka 0,3 mm a průměrem osnovního drátu 0,22 mm viz *Obr. 16 A*.

Pro modelování části hořáku, která je vyplněna skleněnými kuličkami, lze ve Fluentu s výhodou použít funkce porézního prostředí. Model pro simulaci se zjednoduší. Namísto 3D detailního modelu dané komponenty se nastaví poréznost na zjednodušeném modelu nebo na ploše. Porézní prostředí empiricky určí odpor proti proudění v oblasti, kde je poréznost nastavena. Nejedná se o nic jiného než o snížení hybnosti molekul proudícího média [10]. Obecný zápis pro tlakovou ztrátu porézním prostředím je dle [5] definován jako:

$$\Delta p = \left(\frac{\mu}{\alpha} \cdot v + C_2 \cdot \frac{1}{2} \rho v^2 \right) \cdot t \quad (5.11)$$

kde pro tento případ je μ kinematická viskozita metanu, v rychlost proudění metanu, ρ měrná hustota metanu, t tloušťka porézní vrstvy v ose proudění. α je permeabilita prostředí a C_2 je koeficient, obě tyto veličiny se určí ze vztahů:

$$C_2 = \frac{2 \cdot a_0}{\rho \cdot t} \quad (5.12)$$

$$\alpha = \frac{\mu \cdot t}{a_1} \quad (5.13)$$

kde a_0 a a_1 jsou koeficienty získané regresí závislosti $\Delta p=f(v)$, viz kap. 5.3.2.

Do samotného Fluentu pak zadáváme tzv. porozitu – γ , která je definována jako poměr volného prostoru ku prostoru celkovému v daném objemu a převrácenou hodnotu permeability – $1/\alpha$.

Pro získání hodnoty porozity je tedy nejprve třeba určit permeabilitu daného prostředí. Bylo využito dvou různých metod pro její získání a zároveň kontrolu.

5.3.1 Darcyho vztah pro porézní prostředí

V případě laminárního proudění skrz porézní vrstvu je ztráta tlaku úměrná rychlosti, konstanta C_2 může být zanedbána (je nulová při laminárním proudění). Model porézního prostředí se redukuje na tzv. Darcyho zákon (4.11), který dle [5] vstupuje do zdrojových členů pohybové rovnice, viz kap. 3.3.

$$\nabla p = -\frac{\mu}{\alpha} \cdot \vec{v} \quad (5.14)$$

Ztráta tlaku pro směry x, y, z je pak:

$$\Delta p_x = \sum_{j=1}^3 \frac{\mu}{\alpha_{xj}} \cdot v_j \Delta n_x \quad (5.15)$$

$$\Delta p_y = \sum_{j=1}^3 \frac{\mu}{\alpha_{yj}} \cdot v_j \Delta n_y \quad (5.16)$$

$$\Delta p_z = \sum_{j=1}^3 \frac{\mu}{\alpha_{zj}} \cdot v_j \Delta n_z \quad (5.17)$$

v_j – složka rychlosti x, y, z

$\Delta n_{x,y,z}$ – tloušťky média v osách x, y, z

5.3.2 Porozita získaná měřením tlakového spádu

Pro určení porozity touto metodou byly využity hodnoty z *přílohy A* a sestrojen graf závislosti tlakového spádu plynu v hořáku na výstupní rychlosti. Tento byl pak proložen přímkou a provedena její regrese viz *graf 1*. Z regrese jsem použil vypočtené koeficienty $a_0 = 0$, $a_1 = 2106,2$. Aby bylo možné permeabilitu vypočítat, je třeba ještě definovat:

délku porézního prostředí

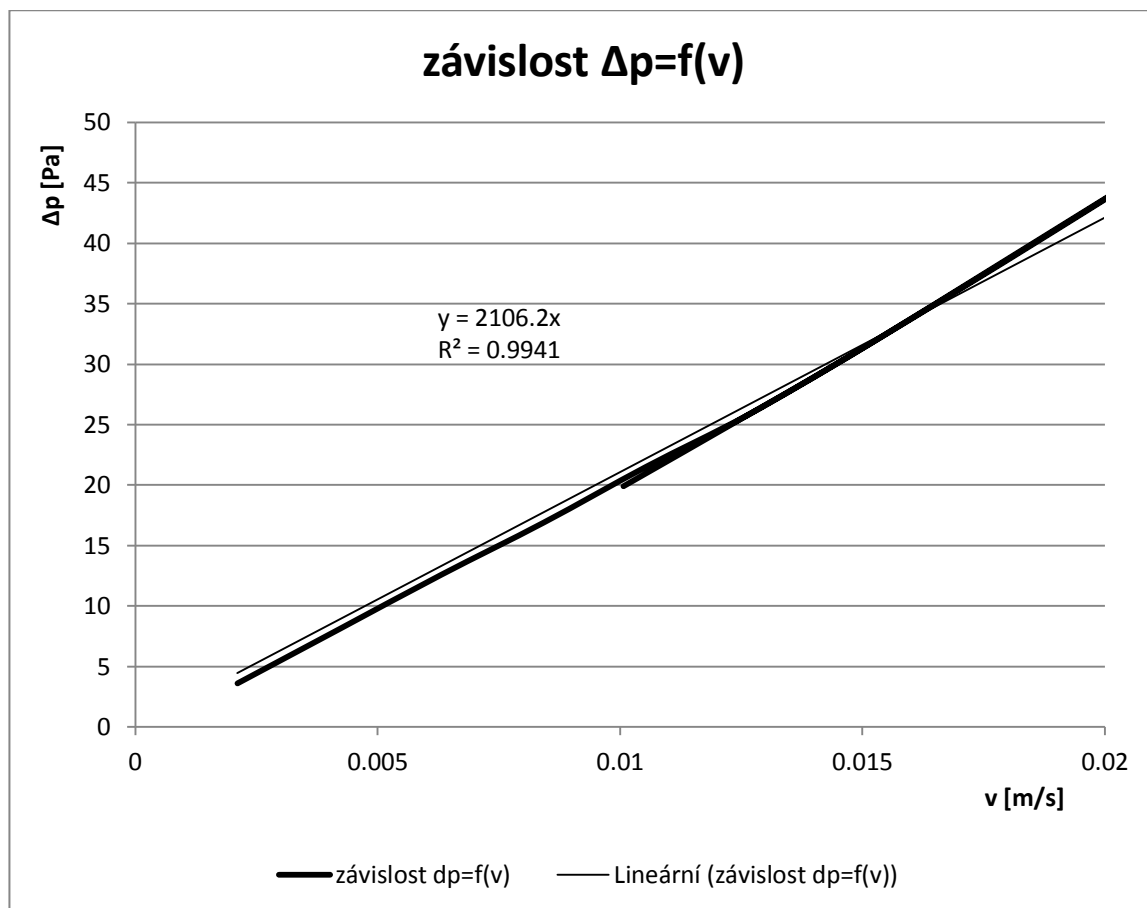
$l = 0,025 \text{ m,}$

kinematickou viskozitu metanu

$\nu_{\text{CH}_4} = 1,536 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1},$

měrnou hustotu metanu

$\rho_{\text{CH}_4} = 0,6679 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}.$



graf 1 Závislost tlakového spádu plynu hořáku na rychlosti

Permeabilita se pak vypočítá jako:

$$\alpha = \frac{l \cdot v}{a_1} = \frac{0,025 \cdot 1,53616 \cdot 10^{-5}}{2106,2} = 1,82338 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \quad (5.18)$$

Její převrácená hodnota – pro Fluent:

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{1}{1,82338 \cdot 10^{-10}} = 54,84 \cdot 10^8 \text{ m}^{-2} \quad (5.19)$$

Porozita γ se v tomto případě odvodí z rovnice (4.17), která je pro tento případ uvedena v uživatelské příručce Fluentu [5]. Pro její výpočet byl použit nástroj řešitel v programu Microsoft Excel:

$$\alpha = \frac{Dp^2}{150} \cdot \frac{\gamma^3}{(1 - \gamma)^2} \quad (5.20)$$

Po vyřešení odvození vyšla hodnota porozity $\gamma = 0,1318201134$ [1].

5.3.3 Porozita získaná poměrem objemů

Jelikož je porozita definována jako poměr objemů volného prostoru ku prostoru celkovému, bylo rozhodnuto vypočítat její hodnotu méně sofistikovaným způsobem.

Jednoduše byly spočítány všechny skleněné kuličky mezi sítěmi z difuzoru hořáku. Díky znalosti objemu prostoru s kuličkami (z rozměrů hořáku – viz obr. 7), počtu kuliček ($p_K=858$) a průměru kuličky ($d_K=3$ mm), bylo snadné určit i porozitu:

1. Objem jedné kuličky:

$$V_1 = \frac{3 \cdot \pi \cdot \left(\frac{d_K}{2}\right)^3}{4} = \frac{3 \cdot \pi \cdot \left(\frac{0,003}{2}\right)^3}{4} = 7,952156 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \quad (5.21)$$

2. Objem všech kuliček:

$$V_K = p_K \cdot V_1 = 858 \cdot 7,952156 \cdot 10^{-9} = 6,82295 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \quad (5.22)$$

3. Objem prostoru, ve kterém jsou kuličky:

$$V_2 = \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot h = \frac{\pi \cdot 0,028^2}{4} \cdot 0,029 = 1,78568 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3 \quad (5.23)$$

kde h je vzdálenost mezi sítěmi, kde se nachází kuličky

4. Porozita:

$$\gamma = \frac{V_2 - V_1}{V_2} = \frac{1,78568 \cdot 10^{-5} - 6,82295 \cdot 10^{-6}}{1,78568 \cdot 10^{-5}} = 0,617908 [1] \quad (5.24)$$

Hodnota porozity získaná touto cestou měla původně sloužit pouze ke kontrole hodnoty z předchozí kapitoly. Avšak ukázalo se, že matematický model s touto hodnotou vykazuje lepší výsledky. Proto byl nakonec použit výsledek nabytý touto cestou.

6 Numerická část

6.1 Matematický model

Jedná se o laminární model proudění, který počítá pouze Arrheniovu rovnici a zanedbává interakce turbulentních chemismů. V souvislosti s tímto nastavením byl výpočet podpořen povolením tzv. Stiff chemistry solver (zpřísnění řešení chemismů), který umožnil přesně definovat, jak často má být ve výpočtu proudění počítána také chemická reakce. Ve výchozím nastavení softwaru je hodnota 10, což znamená, že chemismy jsou počítány pouze v každé desáté iteraci. Pro dosažení vyšší rovnováhy matematického modelu byla zvolena hodnota 1, tedy výpočet chemismů v každé iteraci.

V matematickém modelování je vhodné se držet ověřeného postupu step-by-step – řešení od jednodušších úloh ke složitějším – bylo rozhodnuto začít s přístupem k této úloze jako dvourozměrné (2D) a stacionární. To se významně odrazilo na nárocích, jako jsou výpočetní časy a hardware počítačů. Teprve po úspěšném odladění takto definované úlohy je možné efektivně přejít na řešení problematiky jako 3D.

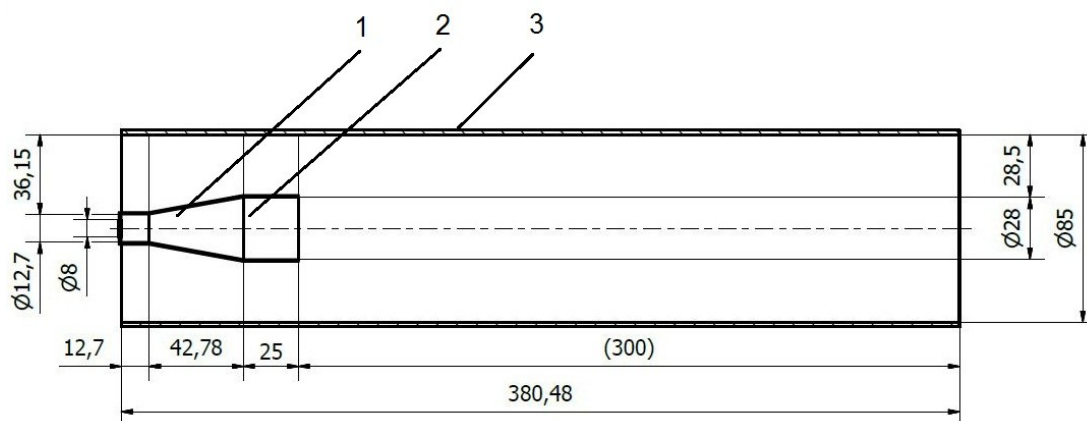
6.2 Tvorba sítě

Při tvorbě geometrie a sítě byl výchozím podkladem výkres sestavení samotného hořáku, který je na obr. 7. Pro modelování byly navrženy dva odlišné přístupy definování okrajových podmínek. V obecné praxi je zvykem řešit podobné úlohy bez vlivu oblasti samotného pohárkového hořáku (např. jeho síťování). Vstupní podmínkou hmotnostního průtoku paliva (metanu) je tedy pouze a přímo výstup z hořáku, v tomto případě se jedná o výstupní průměr 28 mm. Protože se však v našem případě v hořáku nachází porézní prostředí, bylo nezbytné ověřit jeho vliv na matematický výpočet. V důsledku to znamenalo vytvořit síť i uvnitř hořáku a vstupní podmínku průtoku metanu definovat na vstupním průměru hořáku, který má 8 mm.

Již z tvaru pohárku bylo zřejmé, že nebude možné použít ve zkosené části jednoduché čtvercové buňky. Nejvhodnějším řešením bylo použití tzv. funkce *pave*, která vytvoří návaznost sousedících buněk pomocí sklonu stran čtyřúhelníku, obr. 8.

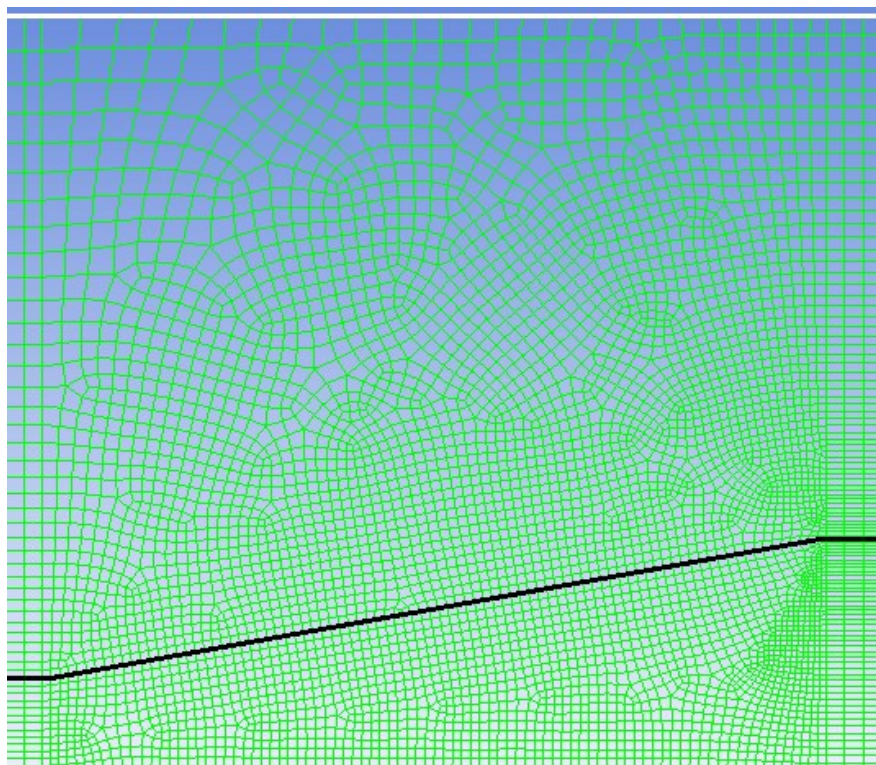
Nebylo tedy třeba využít trojúhelníkových struktur. Navíc díky geometrii řešeného celku bylo možné úlohu pojmout jako osově symetrickou.

Buňky ve zbylém obsahu byly vytvořeny již jako jednoduché pravoúhlé čtyřúhelníky. Pro lepší zachycení plamene bylo provedeno zhuštění sítě v předpokládané oblasti hoření, viz obr. 9. Celkem bylo vygenerováno 41 987 buněk. Sít' byla vytvořena pomocí softwaru Gambit.

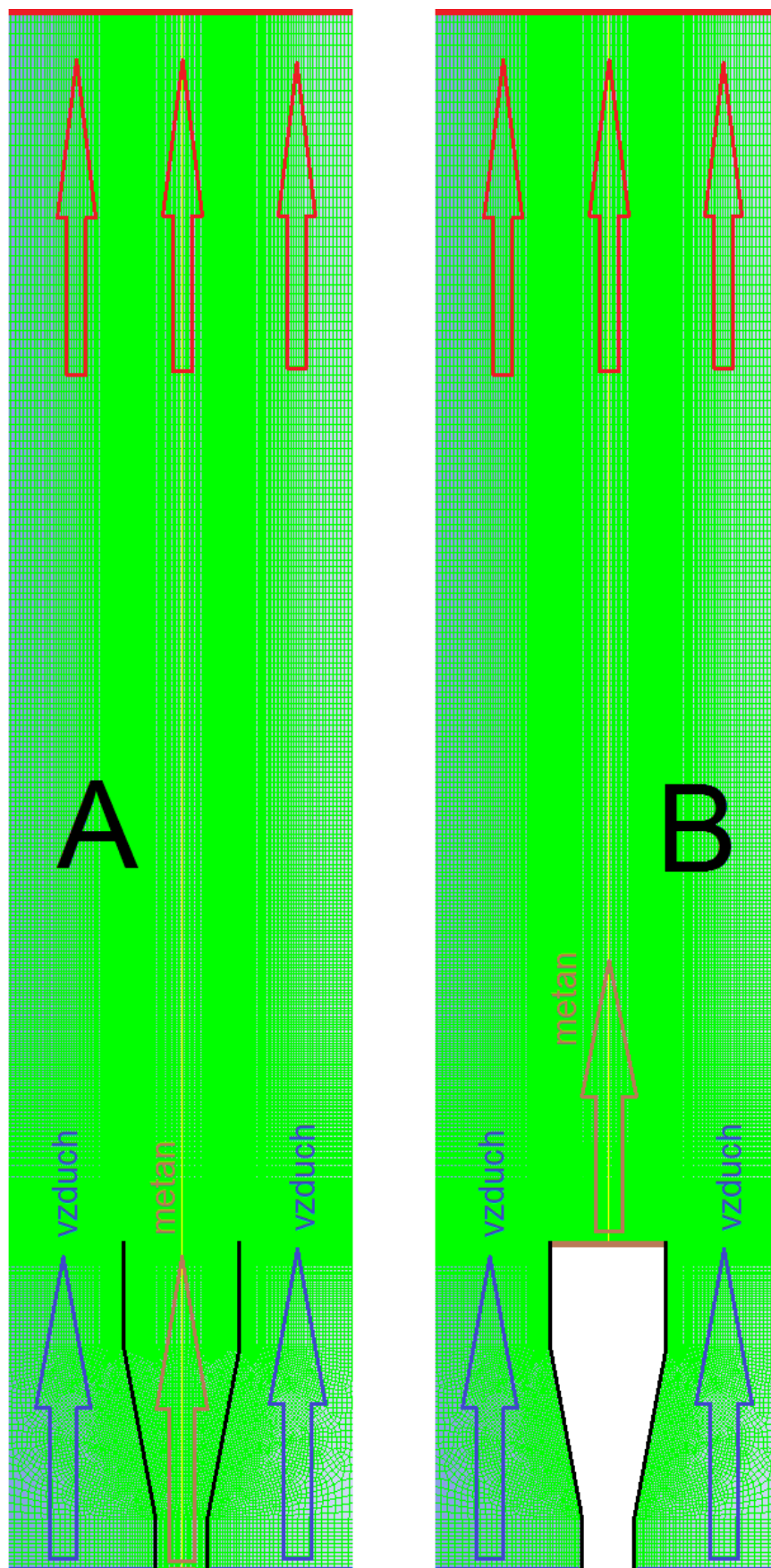


obr. 7 výkres sestavení hořáku

1 – pohárkový hořák, 2 – porézní prostředí, 3 – skleněný ochranný obal



obr. 8 Sít' v okolí sešikmení hořáku pomocí funkce pave



obr. 9 Varianty řešení vstupu paliva

6.3 Okrajové podmínky a fyzikální vlastnosti

Pro vzduch i metan byly v obou případech shodně definovány průtokové vstupní podmínky hmotnostním průtokem (mass flow inlet). Hodnoty hmotnostních průtoků byly získány výpočtem z naměřených hodnot, viz *příloha A*. Tato vstupní podmínka byla zvolena z toho důvodu, že řešíme stlačitelné proudění. Hmotnost je v tomto případě nezávislá na teplotě a tlak je dopočítáván. Stejně tak byly softwarem dopočítány všechny ostatní fyzikální vlastnosti.

Podstatným vstupním údajem je teplota. Pro zachování možnosti porovnávání výsledků s Canterou, byla teplota pro výpočet stanovena na 300 K jak pro metan, tak pro vzduch.

Výstupní podmínka byla definována jako tlaková (pressure outlet), protože spaliny z hořáku odcházely volně do atmosféry.

veličina	označení	jednotka	vstup metan	vstup vzduch
teplota	T	[K]	300	300
hmotnostní průtok	Q_m	[kg/s]	$6.22139 \cdot 10^{-6}$	$8,89021 \cdot 10^{-3}$
hmotnostní podíl	Y_{CH_4}	[1]	1	0
	Y_{O_2}		0	0,23
	Y_{CO_2}		0	0
	Y_{H_2O}		0	0

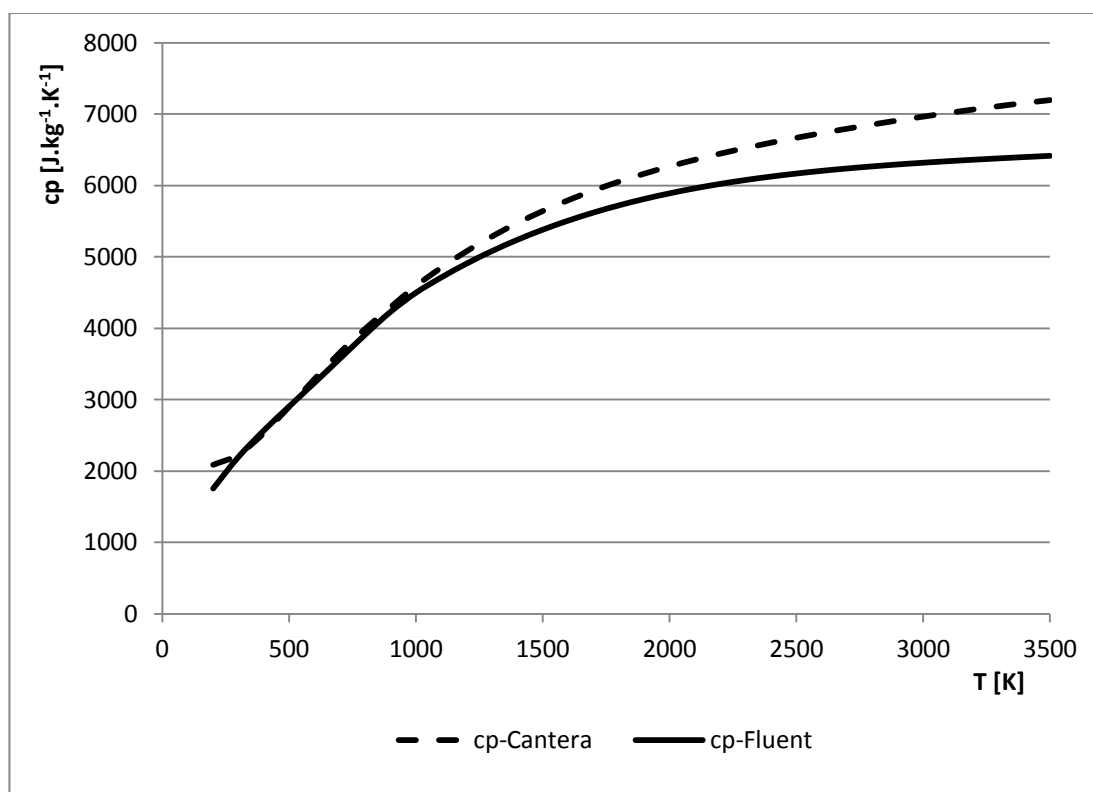
tab. 1 Základní vstupní data na vstupech do hořáku

veličina	označení	jednotka	hodnota
měrné teplo	c_p	$[W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}]$	mixing law
kinematická viskozita	ν	$[mm^2 \cdot s^{-1}]$	kinetická teorie
tepelná vodivost	λ	$[W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}]$	ideal gas mixing law
molární hmotnost	M	$[kg \cdot kmol^{-1}]$	16,04303
entalpie	h	$[J \cdot kmol^{-1}]$	$-7,489518 \cdot 10^7$
entropie	s	$[J \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}]$	186 040,1
termodynamická teplota	T	[K]	298,15
Lennard-Jonesovy parametry	L-J lenght	[°A]	3,758
	L-J energy	[K]	148,6

tab. 2 Definování fyzikálních a chemických vlastností metanu

$c_{p, CH_4} [J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$		
Koeficient	$\Delta T_1 = 300-1000$	$\Delta T_2 = 1000-5000$
a_1	2.671809121E+03	2.093839260E+05
a_2	-7.092645518E+00	6.947361962E+00
a_3	2.551512489E-02	-2.974266205E-03
a_4	-2.514897069E-05	6.344663487E-07
a_5	8.648255236E-09	-5.282279677E-11

tab. 3 Polynomické koeficienty c_p pro metan



graf 2 Porovnání polynomického vyjádření c_p pro metan obou softwarů

Pro jedno-rovnicové chemické modely, byla směs v hořáku tvořena metanem (CH_4), kyslíkem (O_2), oxidem uhličitým (CO_2) a vodní párou (H_2O). Pro dvou-rovnicové modely, pak navíc oxidem uhelnatým (CO). Dále bylo potřeba v chemických rovnicích zadat stechiometrické koeficienty, řád reakce, před-exponenciální faktor a aktivační energie, viz tab. 4.

Chemická reakce	$1 \text{ CH}_4 + 2 \text{ O}_2 \rightarrow 1 \text{ CO}_2 + 2 \text{ H}_2\text{O}$	
řád reakce	první	
před-exponenciální faktor	$1,35 \cdot 10^{20} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	
aktivační energie	$3 \cdot 10^4 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$	
stechiometrický koeficient	CH ₄	1
	O ₂	2
	CO ₂	1
	H ₂ O	2
rychlostní exponent	CH ₄	1
	O ₂	2
	CO ₂	0
	H ₂ O	0
reakce	finite rate	
hustota	Ideal gas	
měrná tepelná kapacita	Mixing law	
tepelná vodivost	Ideal gas mixing law	
viskozita	Ideal gas mixing law	
hmotnostní vodivost	Kinetic theory	
součinitel přestupu tepla	Kinetic theory	

tab. 4 Definování chemismů a fyzikálních vlastností směsi ve Fluentu

Ostatní chemické prvky, které se vyskytují v chemické rovnici, a jejich definování je uvedeno v přílohách G, H, I.

Na základě výpočtu Reynoldsova čísla, viz *příloha A*, bylo k proudění v hořáku přistoupeno jako k laminárnímu. Také bylo použito podpůrného tlakového modelu PISO, který pomáhá stabilizovat proudění. Aby došlo k zapálení proudící smíšené směsi, byla hodnota inicializační teploty stanovena na 2000 K.

Porézní prostředí bylo definováno hodnotami porozity $\gamma=0,618$ a převrácené hodnoty permeability $1/\alpha=5,48 \cdot 10^9 \text{ m}^{-2}$, jejichž výpočet je uveden v kap. 5.3.3.

6.4 Využití FFT pro stanovení dynamiky plamene

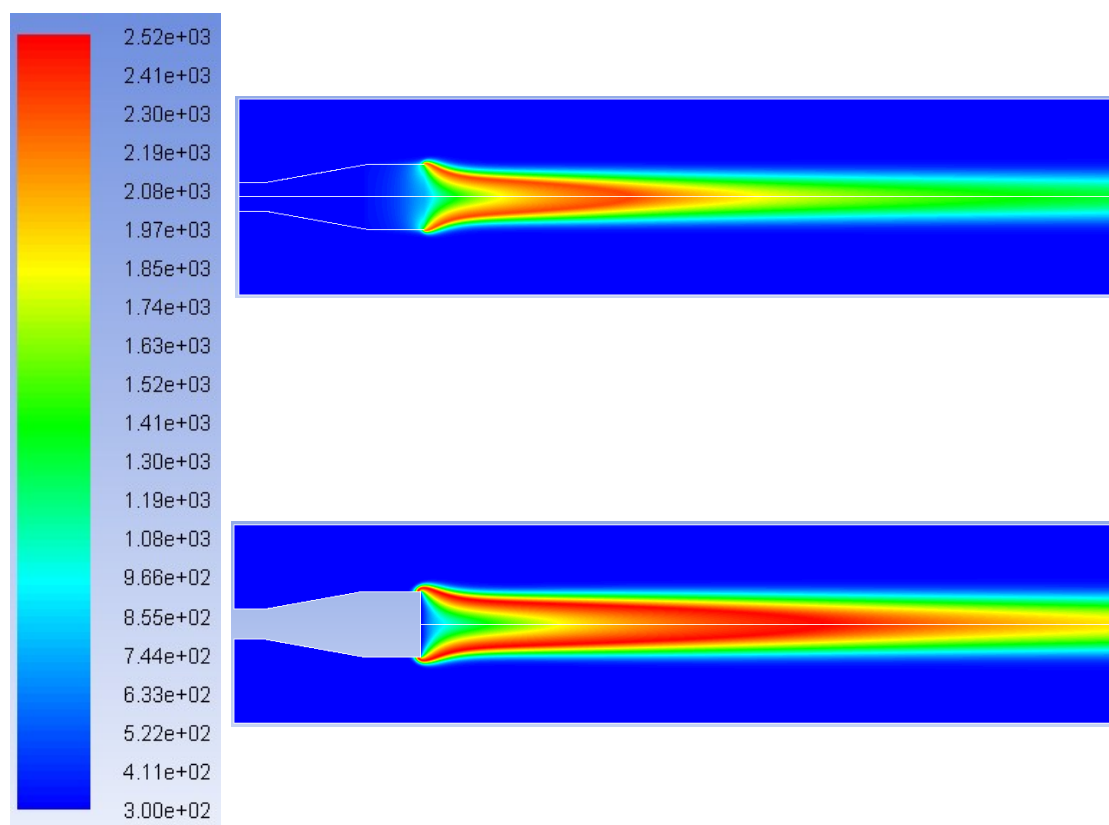
Rychlá Fourierova transformace (Fast Fourier Transform, zkratkou FFT) je efektivní algoritmus pro spočtení diskretní Fourierovy transformace (DFT) a její inverze. FFT je velmi důležitá v mnoha oblastech, od digitálního zpracování signálu přes řešení parciálních diferenciálních rovnic až po rychlé násobení vysokých celých čísel [16].

Software ANSYS Fluent také obsahuje možnost aplikace FFT. Předpokladem použití FFT pro vyhodnocení výsledků je definování úlohy jako časově závislé, musí se tedy jednat o dynamický děj se změnami v čase.

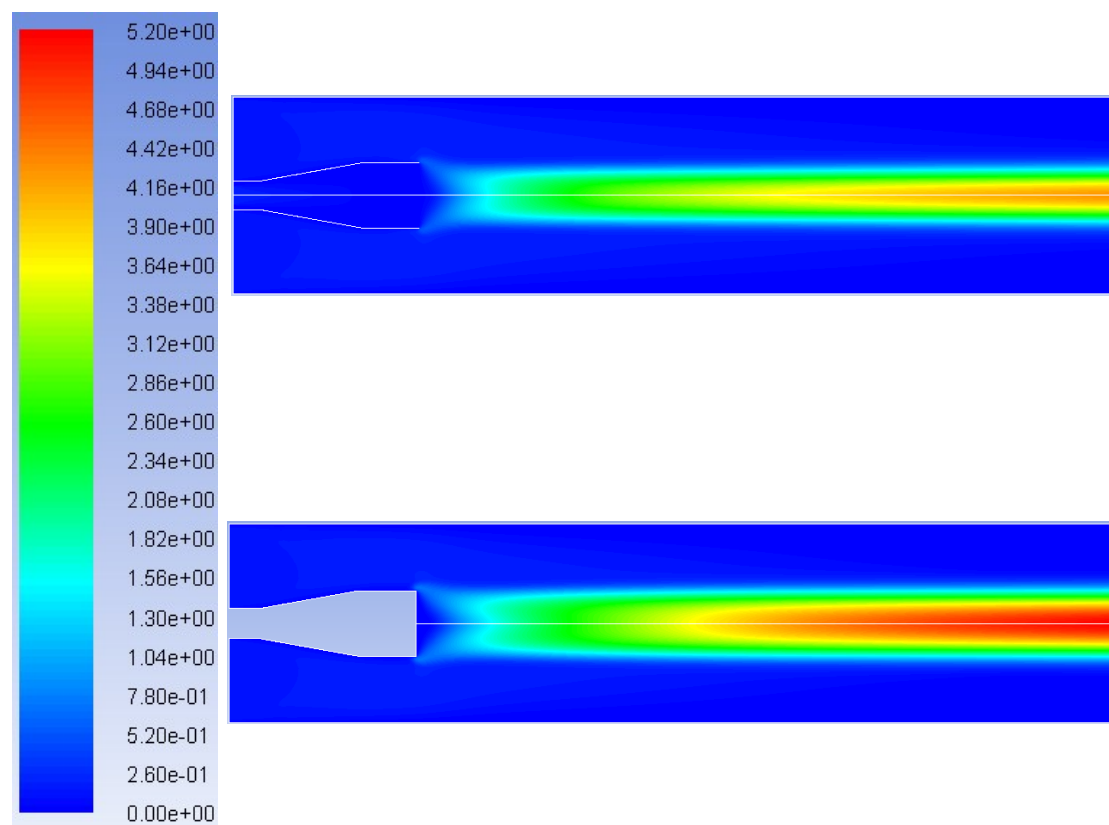
V tomto testovaném případě však zatím nedošlo k řešení úloh jako časově závislých a tedy nebylo třeba využít nástroje FFT. Při budoucím testování dalších příměsí (n-heptanu) se však s nasazením tohoto nástroje počítá, jelikož již z vizuálních výsledků experimentu je patrné silné kmitání plamene, viz příloha D.

6.5 Výsledky řešených úloh

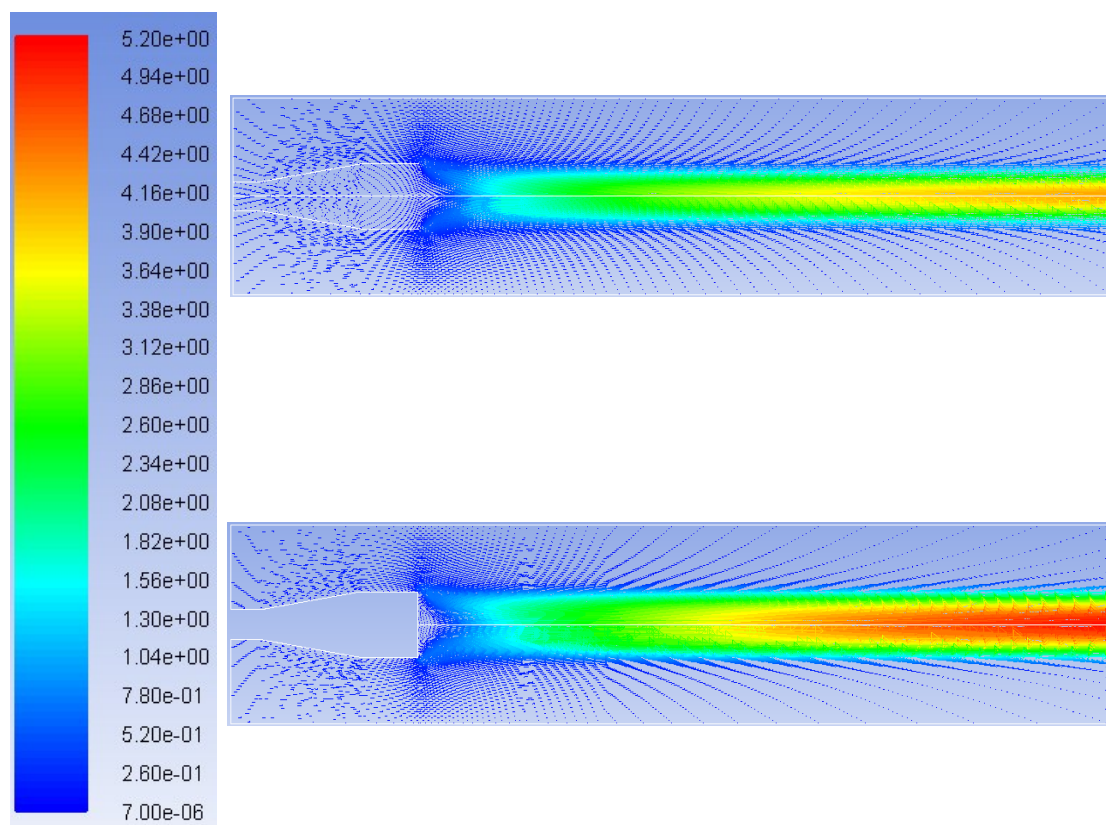
Výsledky uvedené v této kapitole se týkají jedno-rovnicového chemického modelu ZC, popsaného v kap. 4.1 a okrajových podmínek z kap. 6.3. Porovnávají se dvě varianty vytvořených sítí, se sítí v oblasti pohárkového hořáku a bez sítě v této oblasti, viz kap. 6.2. V literatuře se můžeme setkat spíše s výsledky bez uvažování vlivu oblasti samotného pohárku. Spodní z obrázků je vždy v každém porovnání *bez* uvažování porézního prostředí (bez sítě v oblasti pohárku). Všechny ostatní varianty chemických modelů jsou uvedeny v přílohách J, K, L, taktéž pro obě varianty sítě.



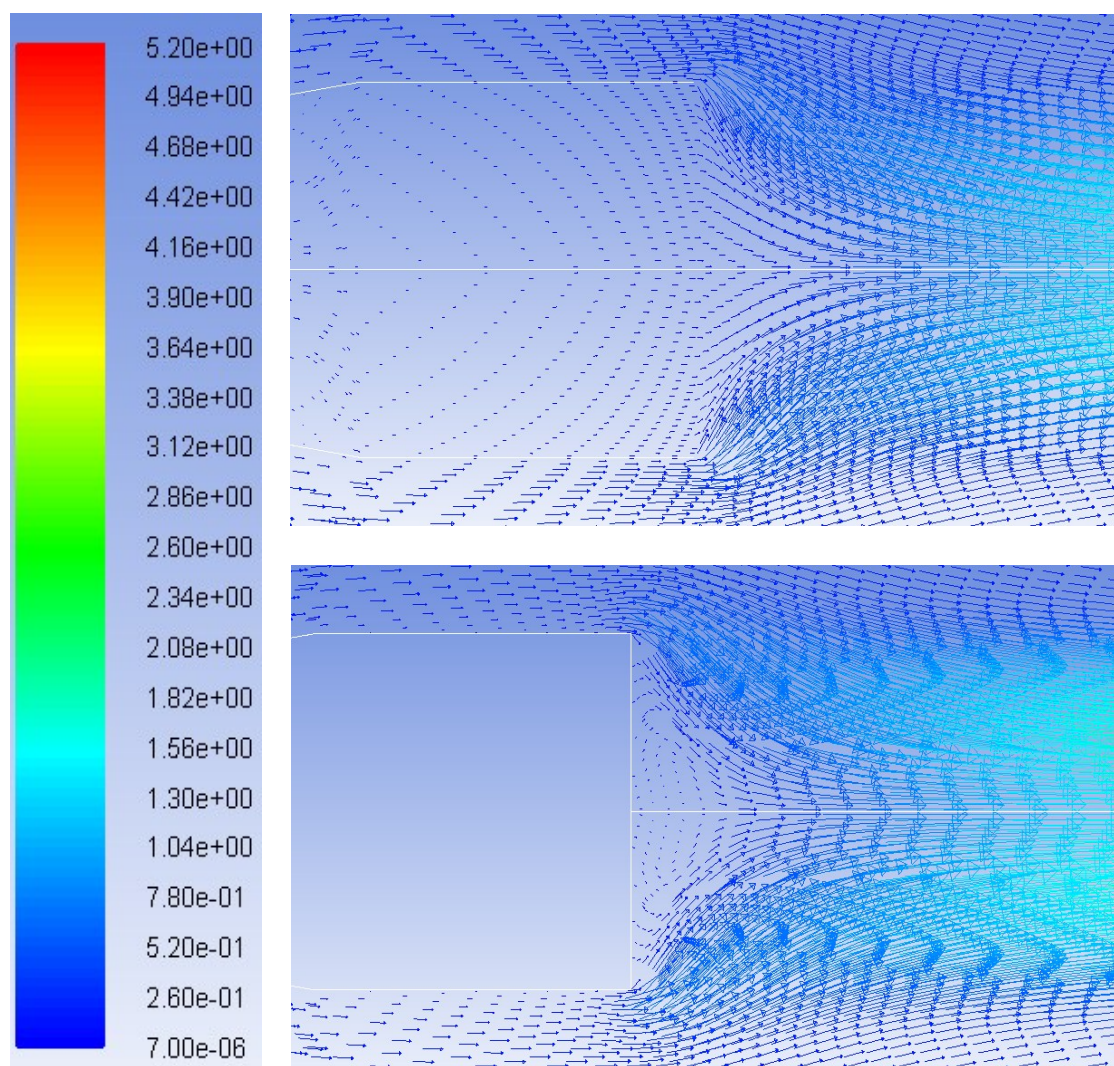
obr. 10 Kontury teplot [K]



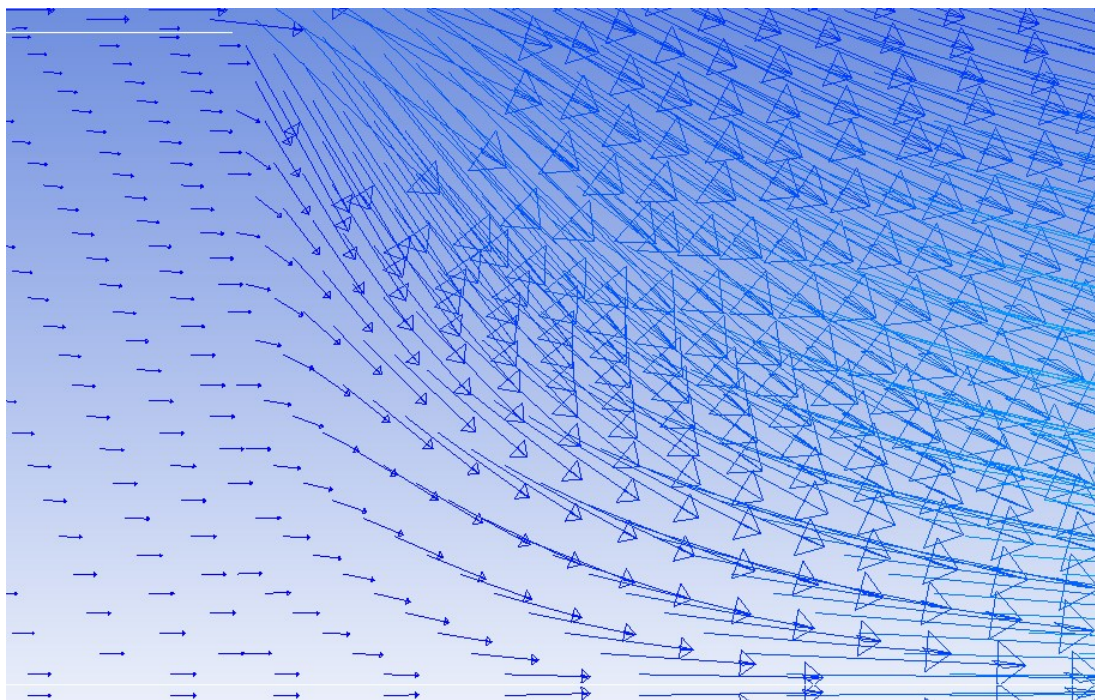
obr. 11 Kontury rychlostí [m/s]



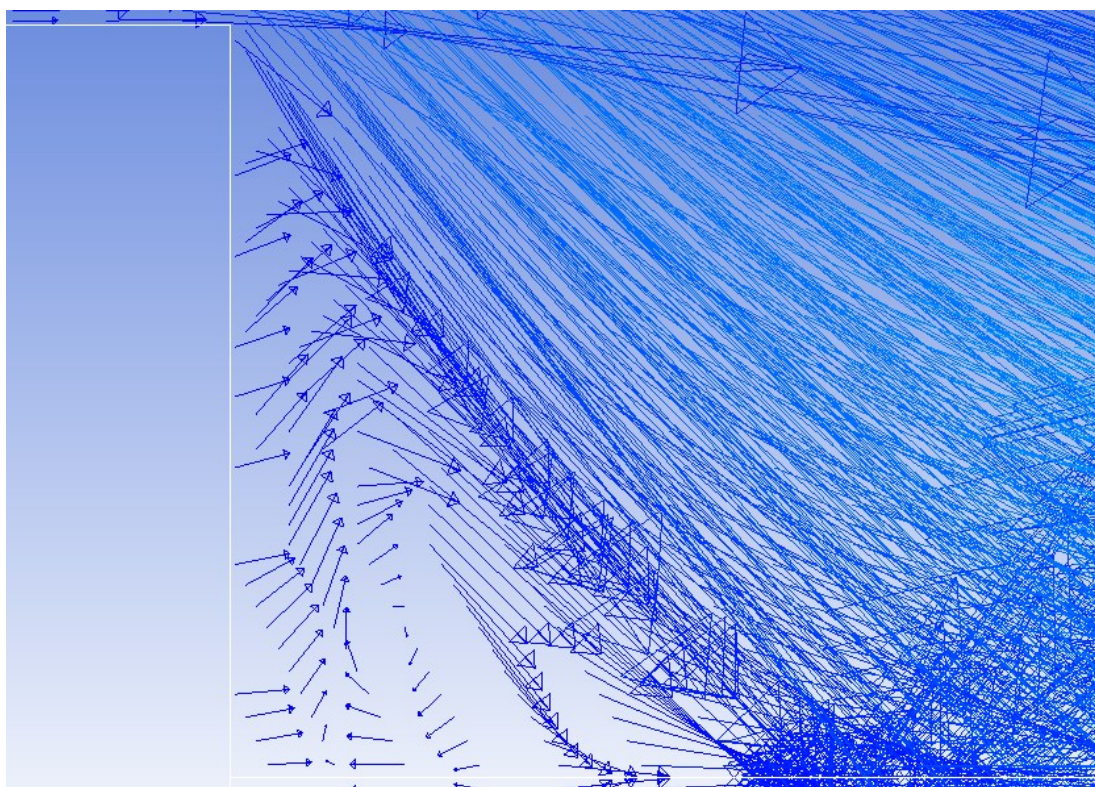
obr. 12 Vektory rychlostí [m/s]



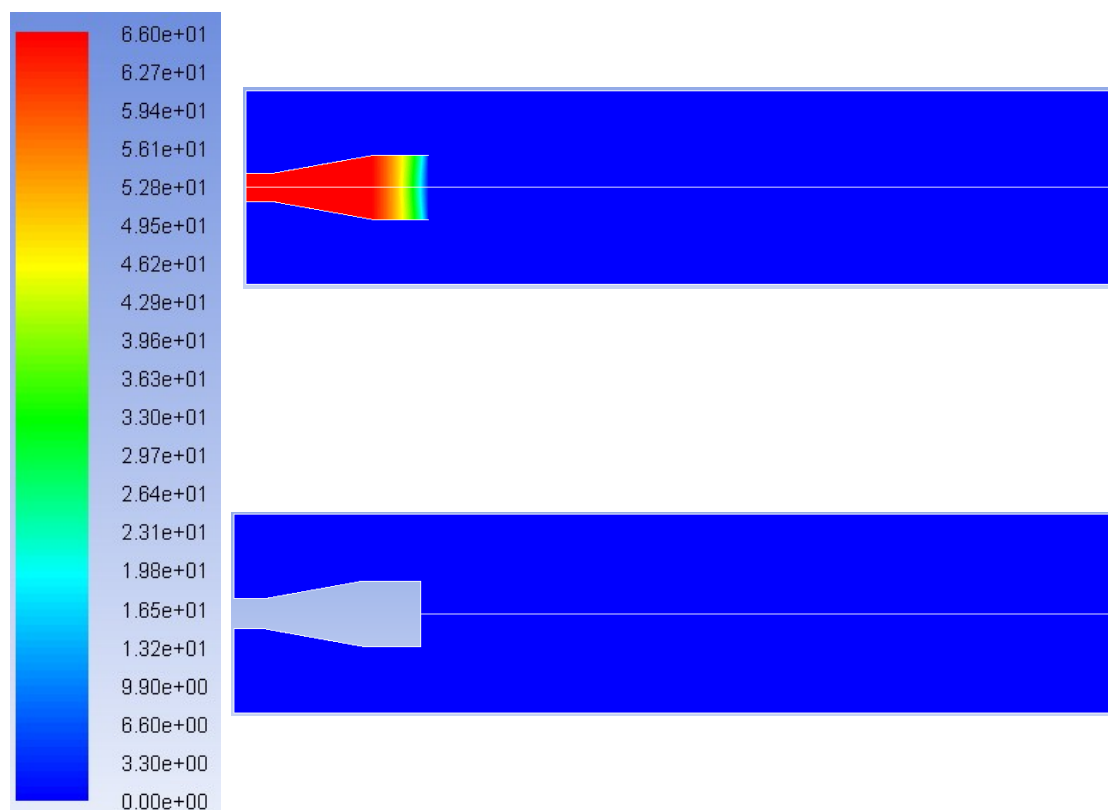
obr. 13 Detail A vektorů rychlostí [m/s]



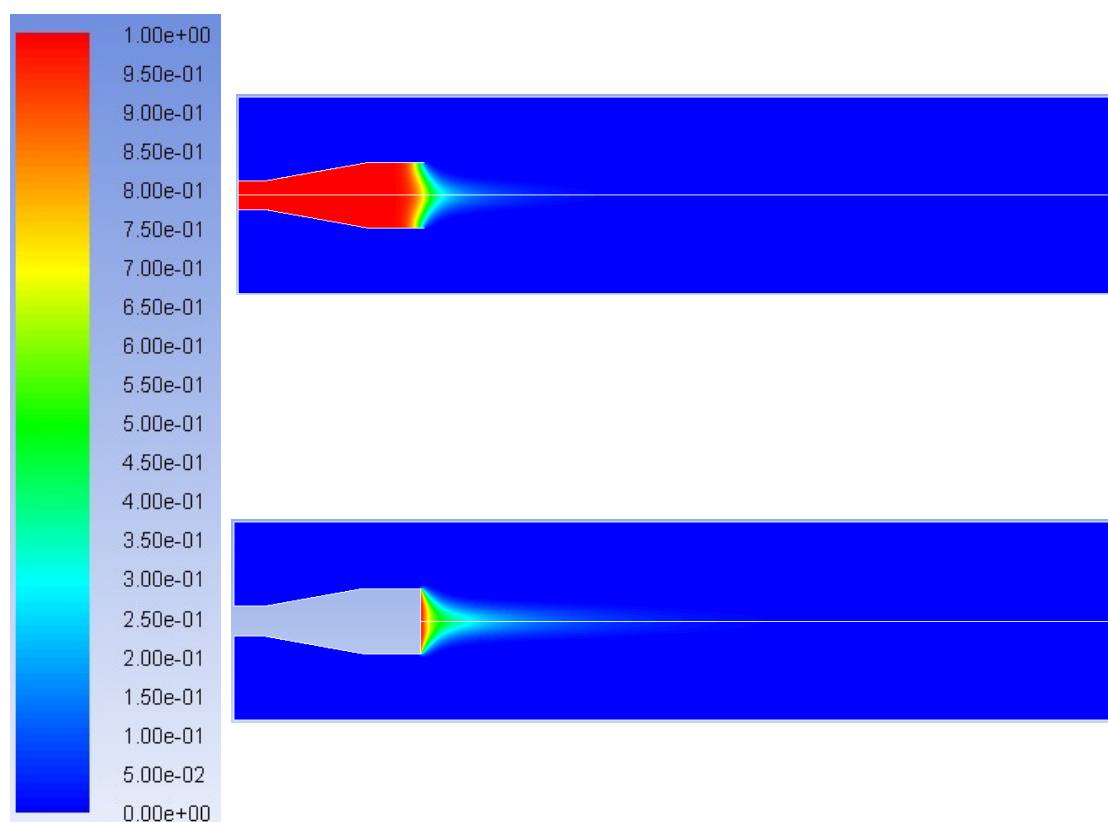
obr. 14 Detail B vektorů rychlostí s porézním prostředím na výstupu z pohárku



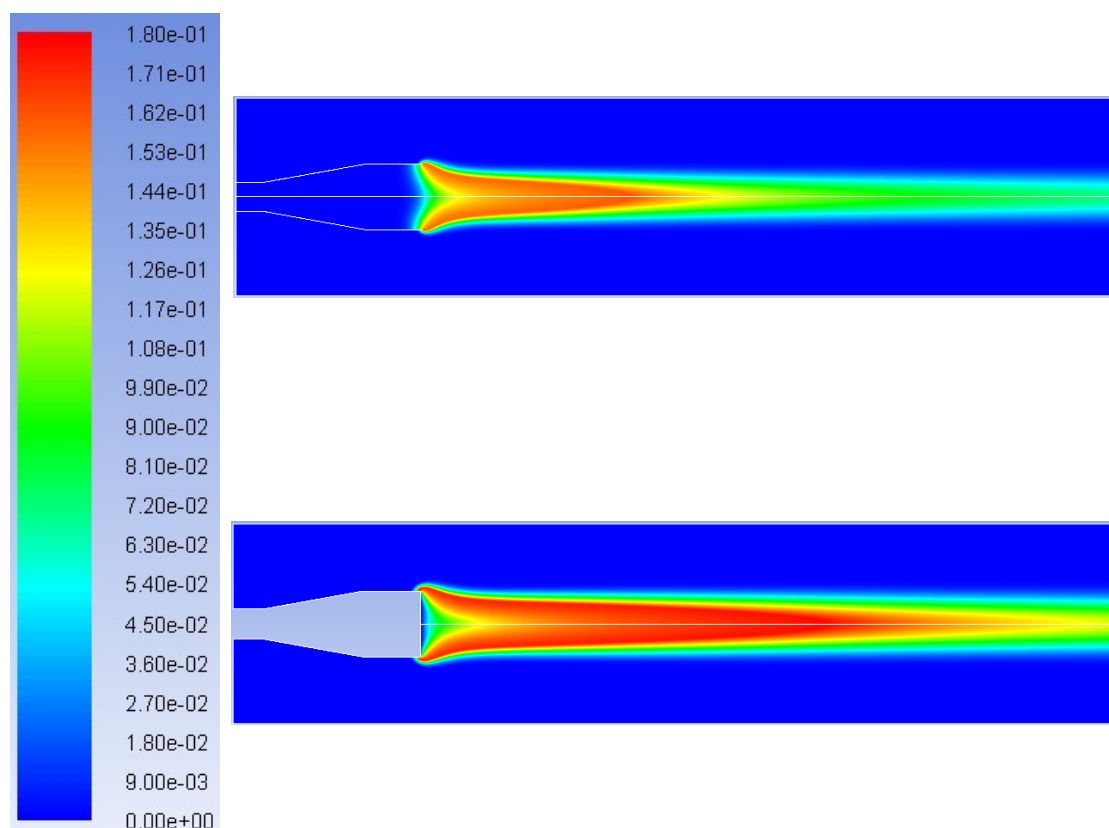
obr. 15 Detail B vektorů rychlostí bez porézního prostředí na výstupu z pohárku



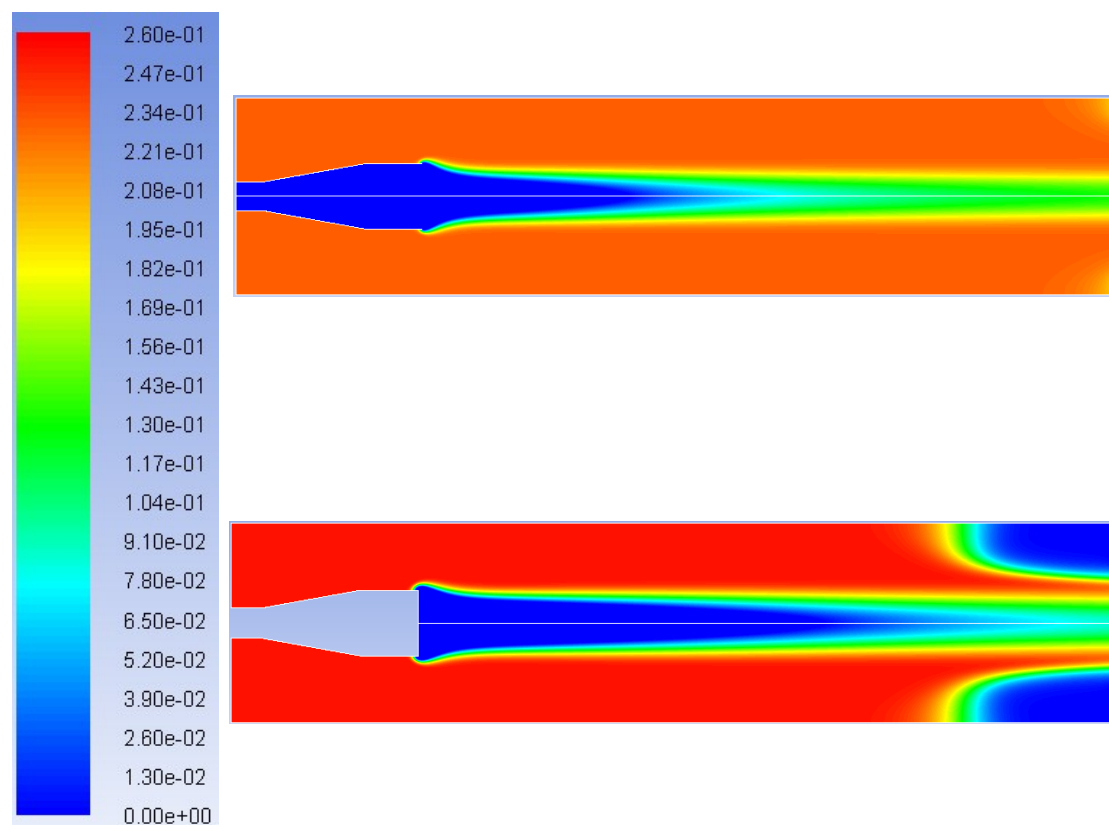
obr. 16 Kontury tlaků [Pa]



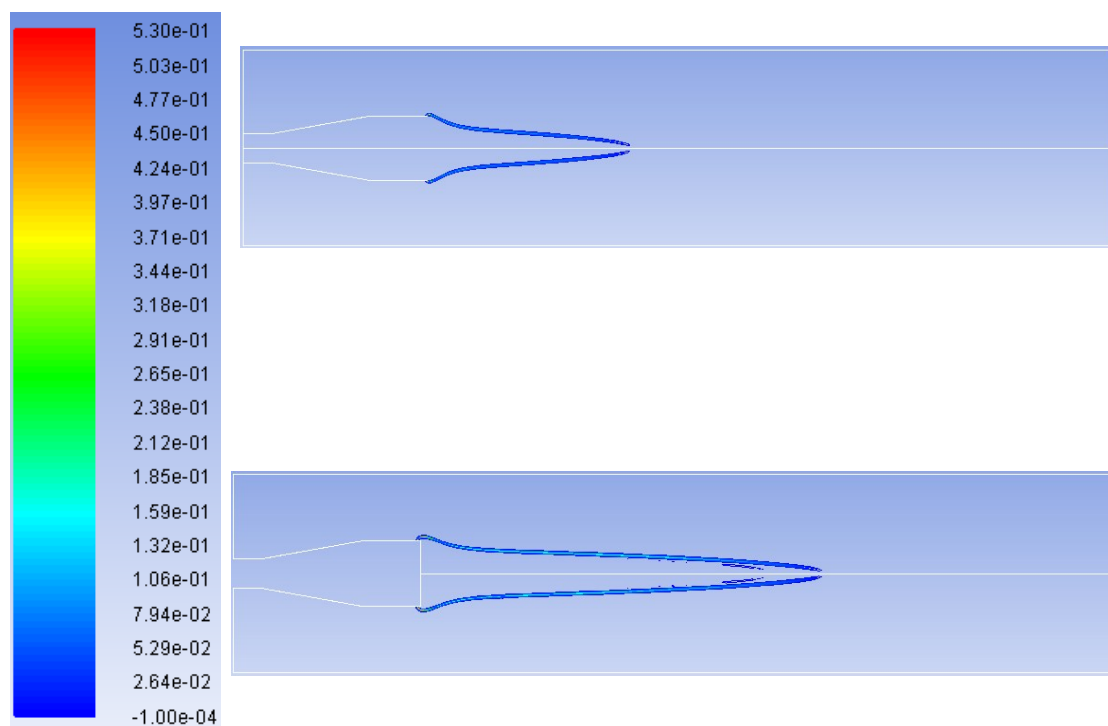
obr. 17 Hmotnostní podíl CH₄ [1]



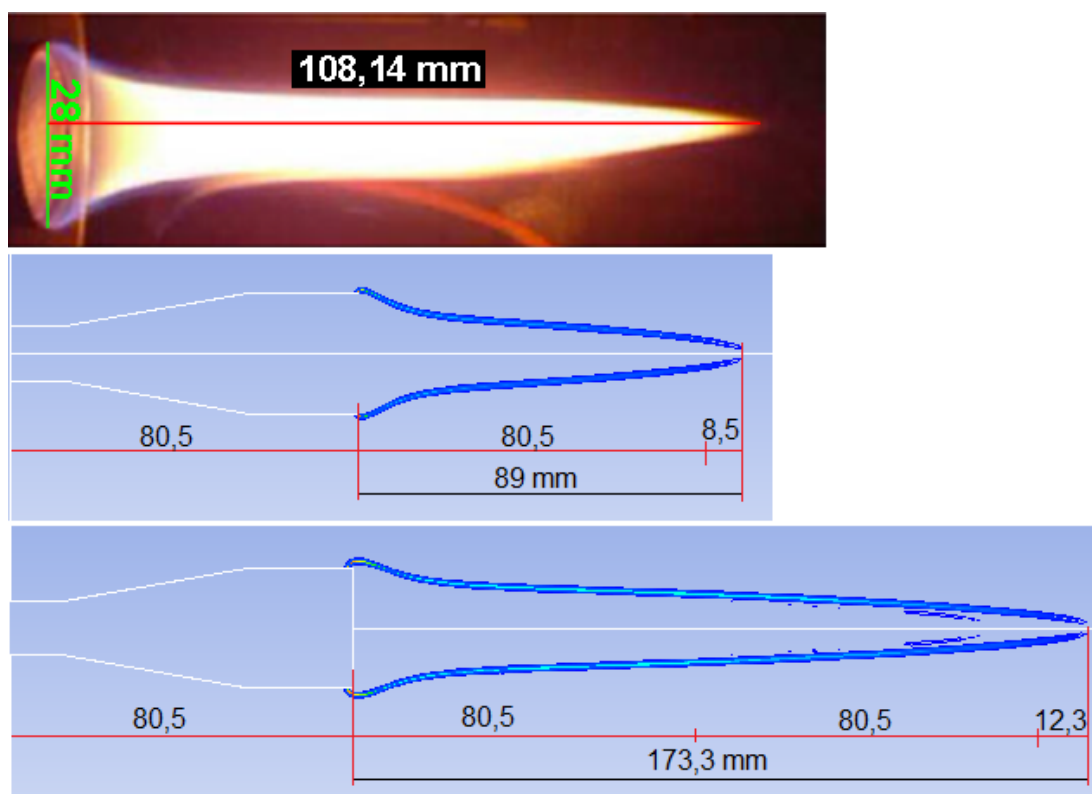
obr. 18 Hmotnostní podíl CO_2 [1]



obr. 19 Hmotnostní podíl O_2 [1]



obr. 20 Teplo vznikající z reakce [W]



obr. 21 Poměrné porovnání vypočtených modelů s experimentem [mm]

6.6 Zhodnocení výsledků

Obě dvě úlohy zkonvergovaly jako časově nezávislé, bez kmitání. Různé přístupy řešení sítě, se sítí v oblasti pohárku (obr. 8A) a bez uvažování této oblasti (obr. 8B), se však výrazně projevily v některých oblastech vyhodnocování.

Z obr. 10 jsou patrné rozdíly maximální teploty hoření, kdy vyšší teploty dosáhla síť bez porézního prostředí. Definováním přesných materiálů a jejich měrných tepelných kapacit bylo v porézním prostředí dosaženo přestupu tepla do skleněných kuliček i pohárku samotného a tedy k úbytku (ztrátě) tepelné energie pro samotný proces spalování.

Z ostatního vyhodnocení je zřejmé, že porézní prostředí má vliv také na jiné důležité vlastnosti. Z obr. 16 je patrné, že porézní vrstva klade odpor proudícímu metanu, čímž dochází k poklesu tlaku za pohárkem a menšímu postupu metanu do oblasti hořáku. To se projevilo především reálnou (zkrácenou) délkou plamene, viz obr. 10, ale především obr. 20 a 21 a je téměř shodná s experimentem. Potvrdit tuto teorii lze z obr. 11, kde vyšší rychlosti proudění dosahuje právě případ bez porézního prostředí.

Po detailním prohlédnutí vektorů rychlostí, obr. 13 - 15, bylo navíc zjištěno, jak velkou roli hraje porézní prostředí v laminarizaci proudění. Průchodem média přes vrstvu kuliček se proudění zpomalilo a usměnilo a za pohárkem se plynule připojilo k obtékajícímu vzduchu, smísilo a takto vzniklá směs začala hořet. V případě bez uvažování vnitřní oblasti pohárku však hned za jeho výstupem vznikala zavíření a průběh proudění byl celkově více neuspořádaný.

Řešení bylo zároveň porovnáváno s výsledky protiproudého hořáku z Cantery, což je volně šiřitelný software pro řešení 1D proudění. Výsledky obou těchto matematických přístupů, viz kap. 3.8, byly shodné. Délka plamene i jeho tvar, při uvažování porézního prostředí, přibližně odpovídají laboratornímu experimentu, což je patrné z obr. 21. Naopak při vynechání sítě v oblasti pohárku vychází délka plamene příliš dlouhá.

Snímek plamene z experimentu je navíc pořízen v určitém časovém okamžiku a nezobrazuje oscilace délky plamene, které se mohou pohybovat v rozmezí $\pm 20\%$. Při této délce plamene, viz obr. 21, se tedy jedná o hodnotu ± 20 mm.

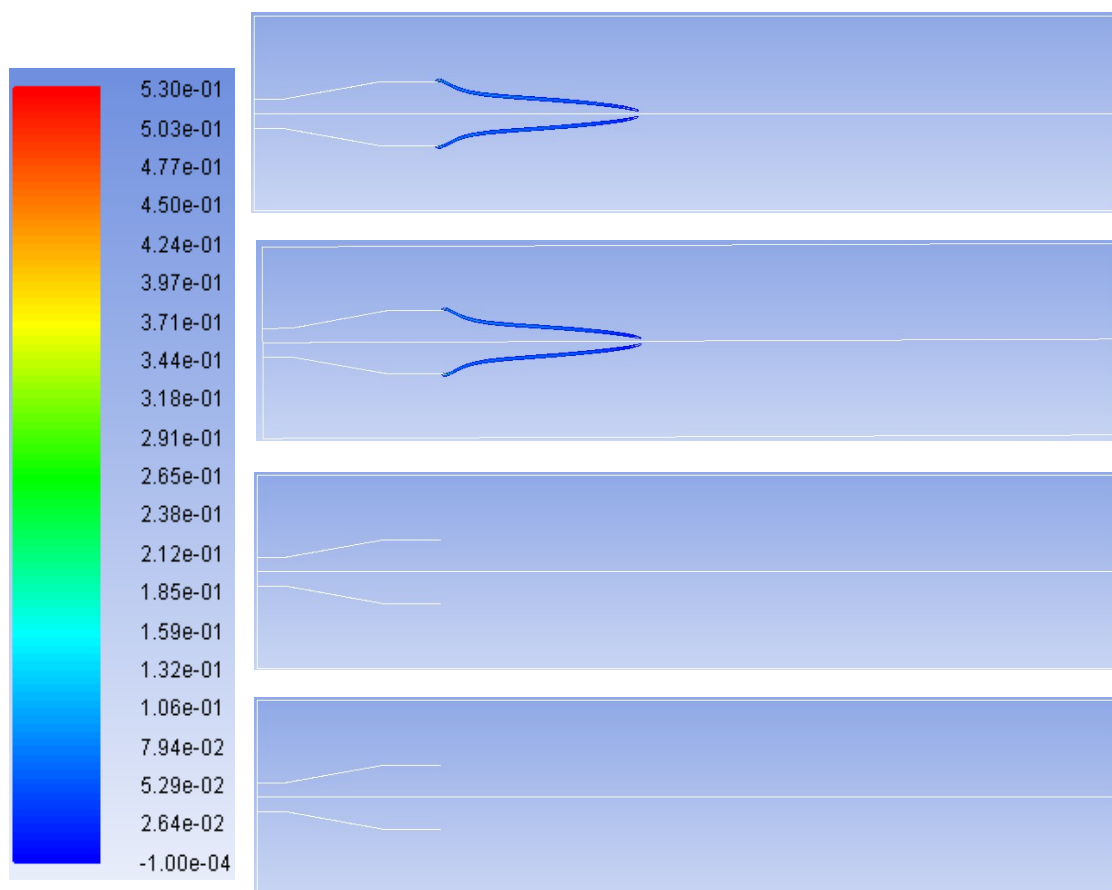
V krajním případě by se tedy varianta se sítí v oblasti pohárku stala téměř totožnou s experimentem. Varianta modelu bez porézního prostředí by i po úpravě hodnoty délky plamene experimentu zůstala stále nadhodnocená.

7 Závěr

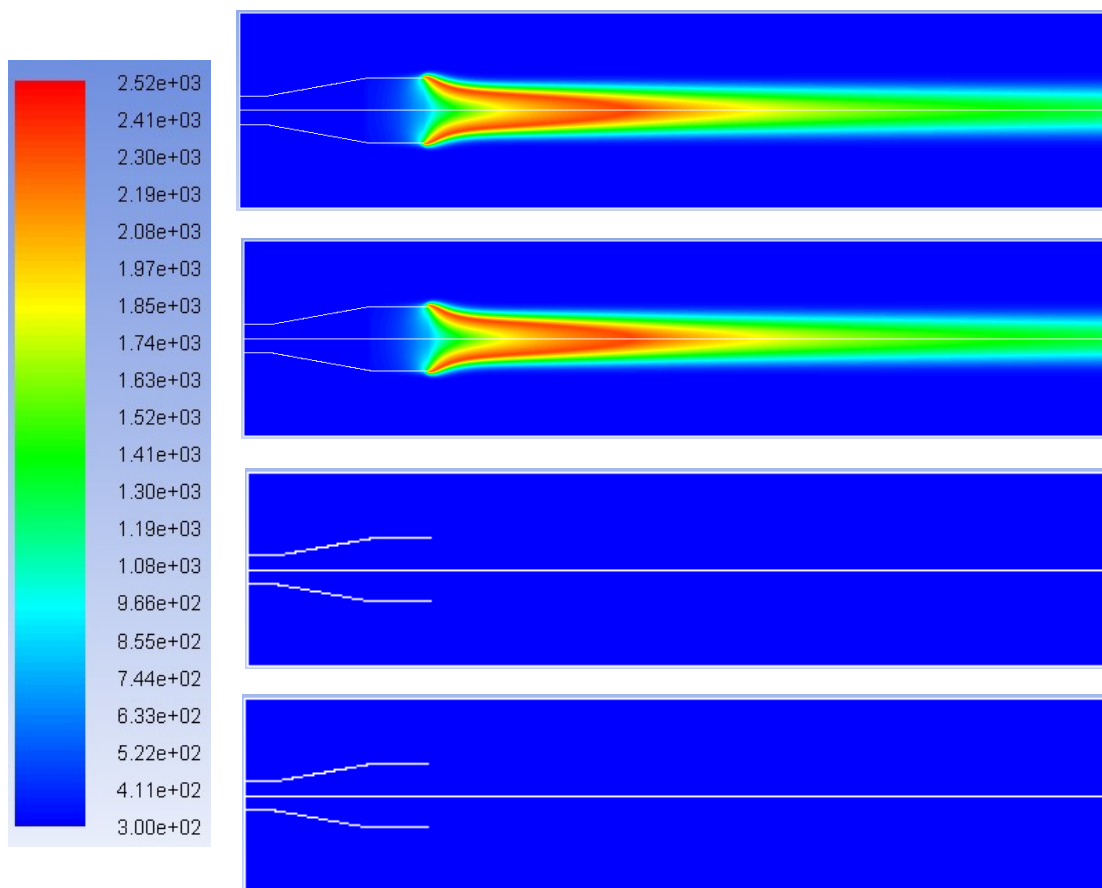
Celé testování všech matematických modelů včetně měření experimentu bylo časově velmi náročné. Práce probíhají nepřetržitě od února 2011, kdy proběhlo první měření experimentu na FBI, a byla vytvořena první dvourozměrná síť. Výběr vhodných chemických modelů, definování správně přepočtených okrajových podmínek, výpočty koeficientů polynomu měrné tepelné kapacity, kontrola matematických přístupů obou použitých softwarů a mnoho dalšího nakonec mělo za následek, že zatím nebylo přistoupeno k řešení úloh jako trojrozměrných (3D).

Všechny řešené úlohy, pro uvedené chemické modely (ZC, PS, CM a WD), zkonvergovaly jako časově nezávislé, bez kmitání. U žádného z těchto modelů tedy nebylo zapotřebí pro vyhodnocení kmitání použít FFT. V následujícím roce však dojde k testování dalších příměsí (např. n-heptanu), kde matematické modely pravděpodobně budou časově závislé, a s nasazením FFT se počítá. Z prvních vizuálních výsledků experimentu je patrné silné kmitání plamene, viz příloha D.

Shoda matematických modelů s experimentem však nastala pouze v případě jedno-rovnicových chemických modelů (PS a ZC), kdy plamen dosahoval přibližně stejných parametrů (v závislosti na síti) jako experiment. U dvou-rovnicových chemických modelů došlo k tzv. uplávání plamene, což se ve výsledku projevilo jako mísení směsi mimo oblast spalování (mimo oblast hořáku), viz obr. 31 a 36 a vůbec nedošlo ke spalování. Odstranění tohoto problému bude pravděpodobně vyžadovat další zkoumání koeficientů polynomu pro přestup tepla, viz rovnice (3.26). Z tohoto důvodu také nejsou ve výsledcích těchto modelů (CM a WD) uvedeny hmotnostní podíly příměsí ani teplo vznikající z reakce. Na obrázcích 22 a 23 je v porovnání vidět, že u dvou-rovnicových modelů žádné teplo nevzniká, protože nedochází k hoření.



obr. 22 Porovnání tepla z reakce všech chemických modelů [W]
pořadí ze shora: ZC, PS, CM, WD



obr. 23 Porovnání kontur teploty všech chemických modelů [K]
pořadí ze shora: ZC, PS, CM, WD

Úlohy byly souběžně testovány na FBI za použití softwaru Cantera, což je zjednodušená varianta softwaru Fluent, která k úlohám přistupuje jako jedno-rozměrným. Testování probíhalo na jednoduchém modelu protiproudého hořáku. Mezi výsledky z Fluentu a Cantery nebyly rozdíly.

8 Literatura

- [1] KOZUBKOVÁ, M.: *Modelování proudění tekutin FLUENT, CFX*. [online]. Ostrava: VŠB-TU Ostrava, 2010. 154 s. Dostupné z: <<http://www.338.vsb.cz/studium9.htm>>
- [2] KOZUBKOVÁ, M.: *Simulace a modelování hydraulických systémů*. [online]. Ostrava: VŠB-TU Ostrava, 2010. 128 s. Dostupné z: <<http://www.338.vsb.cz/studium9.htm>>
- [3] BOJKO, M.: *3D Proudění – ANSYS Fluent*. [online]. Ostrava: VŠB-TU Ostrava, 2010. 226 s. Dostupné z: <<http://www.338.vsb.cz/studium9.htm>>
- [4] FRASSOLDATI, A. et al: *Simplified kinetic schemes for oxy-fuel combustion*. Milano: Politecnico di Milano, Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica, 2009, s. 14.
- [5] Fluent 13 - *User's Guide*. Fluent Inc, 2009 [online]. Dostupné z: <<http://spc.vsb.cz/portal/cz/documentation/manual/index.php>>.
- [6] DRÁBKOVÁ, S. 2007. *Mechanika tekutin*. [Dokument] Ostrava : VŠB-TUO, 2007. ISBN 978-80-248-1508-4.
- [7] KOZUBKOVÁ, M., Blejchař, T. a Bojko, M. 2011. *Modelování přenosu tepla, hmoty a hybnosti*. Ostrava : VŠB-TUO, 2011. ISBN 978-80-248-2491-8.
- [8] P.G.F.v.CANSARD. 2009. *An investigation of the behavior of different fuels in a co-flow flame configuration with CFD*. [Dokument] Eindhoven : Technische Universiteit Eindhoven, 2009. WVT 2009.13.
- [9] BIRD, R. B., STEWARD, W. E., LINGHTFOOT, E. N. 2004. *Transport Phenomena*. New York : John Wiley & Sons, INC., 2004. ISBN 0-471-41077-2.
- [10] RASZKA, J.: *Matematické modelování proudění přes porézní vrstvu v Ansys Fluent 13.0*. Ostrava : VŠB-TUO, 2011. 22 s..
- [11] BITALA, P. 2012. *Některé aspekty detekce požáru z pohledu integrace požárně - bezpečnostních zařízení*. Ostrava, 2012. 146 s. Disertační práce, VŠB-TUO, Fakulta bezpečnostního inženýrství.
- [12] KOZUBKOVÁ, M.: *Proudění plynů s chemickou reakcí*. Ostrava : VŠB-TUO, 2001.

- [13] Enthalpy [online], poslední aktualizace 6. května 2012 7:31
[cit. 16. 12. 2001], Wikipedie. Dostupné z:
<<http://en.wikipedia.org/wiki/Enthalpy>>
- [14] Kolektiv autorů: Základy spalování. [online]. Ostrava: VŠB-TU
Ostrava, 2009. 114 s. Dostupné z:
< http://vec.vsb.cz/userfiles/pdf/studijni-materialy/zakl_spal.pdf >
- [15] Entropy [online], poslední aktualizace 28. dubna 2012 7:28
[cit. 20. 11. 2001], Wikipedie. Dostupné z:
< <http://en.wikipedia.org/wiki/Entropy> >
- [16] Fast Fourier transform [online], poslední aktualizace 4. května 2012
2:53 [cit. 25. 2. 2002], Wikipedie. Dostupné z:
< <http://en.wikipedia.org/wiki/Fft> >
- [17] ZEGERS, C. P. R. *Flame stabilization of oxy-fuel flames: Master Thesis*. Eindhoven: Eindhoven University of Technology, Department of Mechanical Engineering, Division Thermo Fluids Engineering, 2007, 72 s. Supervisor: L.P.H. de Goey.
- [18] Andersen, J. et al: *Global Combustion Mechanisms for Use in CFD Modeling under Oxy-Fuel Conditions*. Lyngby: Technical University of Denmark, Department of Chemical and Biochemical Engineering, 2008, s. 1379-1389.

9 Seznam příloh

A. Tabulka naměřených a vypočtených hodnot.....	59
B. Koncentrace MEC pro CO ₂	60
C. Koncentrace MEC pro N ₂	60
D. Koncentrace MEC pro Ar.....	61
E. Výpočet entalpie.....	62
F. Výpočet entropie.....	63
G. Definování O ₂	64
H. Definování CO ₂	65
I. Definování H ₂ O.....	66
J. Výsledky jednorovnicového chemismu PS.....	67
K. Výsledky dvou-rovnicového chemismu CM.....	72
L. Výsledky dvou-rovnicového chemismu WD.....	75

D=0.028 m													
Q _{vz} [ml/min]	p [Pa]	Q _{vz} [m³/s]	p _{sk} [Pa]	V _{CH4} [cm/s]	V _{CH4} [m/s]	Q _{CH4} [ml/min]	Q _{CH4} [m³/s]	k Q _{vz} /Q _{CH4}	Re [1]	λ [1]	ξ [1]	Δp [Pa]	Q ^m _{CH4} [kg/s]
718	-16.7	1.196E-05	21.0	1.5	0.015	554.2000	9.23E-06	1.284686	27.34094	2.34081235	2.09001103	0.00015704	6.169E-06
598	-20.6	9.966E-06	17.1	1.25	0.0125	461.8000	7.69E-06		22.78411	2.80897483	2.50801324	1.30867E-04	5.140E-06
478	-24.1	7.966E-06	13.6	1	0.01	369.5000	6.15E-06		18.22729	3.51121853	3.13501655	0.00010469	4.113E-06
100	-34.7	1.666E-06	3.0	0.2106908	0.00210691	77.84000	1.29E-06		3.840323	16.6652651	14.8797010	2.2058E-05	8.664E-07
200	-31.9	3.333E-06	5.8	0.4213817	0.00421382	155.6800	2.59E-06		7.680646	8.33263256	7.43985050	4.4116E-05	1.732E-06
300	-29.1	5.000E-06	8.6	0.6320725	0.00632072	233.5200	3.8E-06		11.52097	5.55508837	4.95990033	6.6174E-05	2.599E-06
400	-26.3	6.666E-06	11.4	0.8427633	0.00842763	311.3600	5.18E-06		15.36129	4.16631628	3.71992525	8.8232E-05	3.465E-06
500	-23.5	8.333E-06	14.2	1.0534541	0.01053454	389.2000	6.48E-06		19.20161	3.33305302	2.97594020	0.00011029	4.332E-06
600	-20.5	1.000E-05	17.2	1.2641450	0.01264145	467.0400	7.78E-06		23.04194	2.77754419	2.47995017	0.00013235	5.198E-06
700	-17.2	1.166E-05	20.5	1.4748358	0.01474836	544.8800	9.08E-06		26.88226	2.38075216	2.12567157	0.00015441	6.065E-06
800	-14.1	1.333E-05	23.6	1.6855266	0.01685527	622.7200	1.03E-05	30.72258	2.08315814	1.85996263	0.00017646	6.931E-06	
900	-10.7	1.500E-05	27.0	1.8962175	0.01896217	700.5600	1.16E-05	34.56291	1.85169612	1.65330011	0.000198522	7.798E-06	
1000	-7.4	1.666E-05	30.3	2.1069083	0.02106908	778.4000	1.29E-05	38.40323	1.66652651	1.48797010	0.00022058	8.664E-06	
718	-16.7	1.196E-05	21.0	1.5127602	0.01512760	558.8912	9.31E-06	27.57352	2.32106757	2.07238176	0.00015838	6.221E-06	
598	-20.6	9.966E-06	17.1	1.2599312	0.01259931	465.4832	7.75E-06	22.96513	2.78683363	2.48824431	0.00013191	5.181E-06	
478	-24.1	7.966E-06	13.6	1.0071022	0.01007102	372.0752	6.20E-06	18.35674	3.48645714	3.11290816	0.00010544	4.141E-06	

A. Tabulka naměřených a vypočtených hodnot



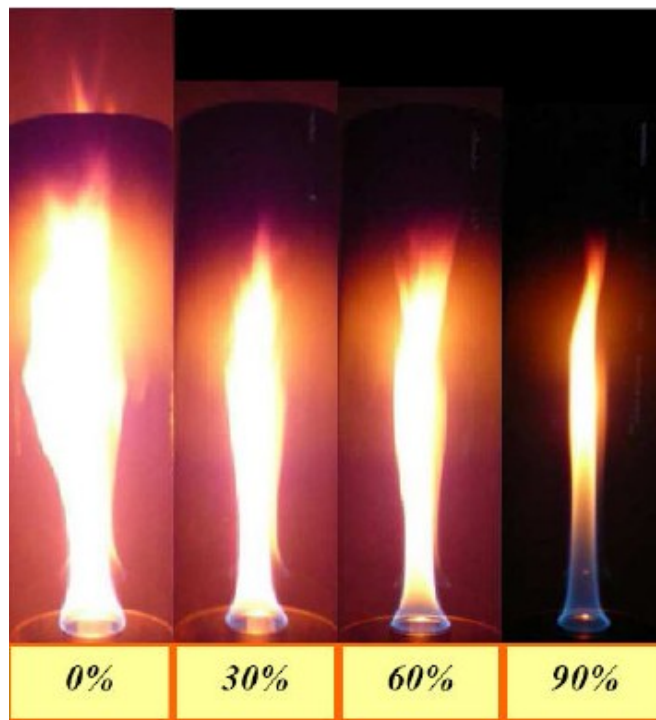
B. Koncentrace MEC pro CO₂

Sekvence snímků plamene metanu při $v=1,5$ cm/s, $Q_{v,CH_4}=40\text{dm}^3/\text{min}$ při různých koncentracích MEC hodnoty hasící koncentrace CO₂ [11]



C. Koncentrace MEC pro N₂

Sekvence snímků plamene metanu při $v=1,5$ cm/s, $Q_{v,CH_4}=40\text{dm}^3/\text{min}$ při různých koncentracích MEC hodnoty hasící koncentrace N₂ [11]



D. Koncentrace MEC pro Ar

Sekvence snímků plamene n-heptanu při $v=1,5 \text{ cm/s}$, $Q_{v,n\text{-heptan}}=40\text{dm}^3/\text{min}$ při různých koncentracích MEC hodnoty hasící koncentrace Ar [11]

E. Výpočet entalpie

Odvození entalpie z polynomického tvaru podle Cantery:

$$\frac{H}{RT} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + \frac{a_6}{T}$$

$$\begin{aligned}\bar{h} &= \int_{T_{ref}}^T (Ra_1 + Ra_2 \cdot T + Ra_3 \cdot T^2 + Ra_4 \cdot T^3 + Ra_5 \cdot T^4) dT \\ \bar{h} &= \int_0^T (Ra_1 + Ra_2 \cdot T + Ra_3 \cdot T^2 + Ra_4 \cdot T^3 + Ra_5 \cdot T^4) dT - \\ &\quad - \int_0^{T_{ref}} (Ra_1 + Ra_2 \cdot T + Ra_3 \cdot T^2 + Ra_4 \cdot T^3 + Ra_5 \cdot T^4) dT = \\ &= [Ra_1 \cdot T]_0^T + \left[Ra_2 \cdot \frac{T^2}{2} \right]_0^T + \left[Ra_3 \cdot \frac{T^3}{3} \right]_0^T + \left[Ra_4 \cdot \frac{T^4}{4} \right]_0^T + \left[Ra_5 \cdot \frac{T^5}{5} \right]_0^T - \\ &\quad - [Ra_1 \cdot T]_0^{T_{ref}} + \left[Ra_2 \cdot \frac{T^2}{2} \right]_0^{T_{ref}} + \left[Ra_3 \cdot \frac{T^3}{3} \right]_0^{T_{ref}} + \left[Ra_4 \cdot \frac{T^4}{4} \right]_0^{T_{ref}} + \left[Ra_5 \cdot \frac{T^5}{5} \right]_0^{T_{ref}} \\ \bar{h} &= Ra_1 \cdot T + Ra_2 \cdot \frac{T^2}{2} + Ra_3 \cdot \frac{T^3}{3} + Ra_4 \cdot \frac{T^4}{4} + Ra_5 \cdot \frac{T^5}{5} - \\ &\quad - \left(Ra_1 \cdot T_{ref} + Ra_2 \cdot \frac{T_{ref}^2}{2} + Ra_3 \cdot \frac{T_{ref}^3}{3} + Ra_4 \cdot \frac{T_{ref}^4}{4} + Ra_5 \cdot \frac{T_{ref}^5}{5} \right) \\ \frac{\bar{h}}{RT} &= a_1 + a_2 \cdot \frac{T}{2} + a_3 \cdot \frac{T^2}{2} + a_4 \cdot \frac{T^3}{4} + a_5 \cdot \frac{T^4}{5} - \\ &\quad - \underbrace{\left(a_1 \cdot T_{ref} + a_2 \cdot \frac{T_{ref}^2}{2} + a_3 \cdot \frac{T_{ref}^3}{3} + a_4 \cdot \frac{T_{ref}^4}{4} + a_5 \cdot \frac{T_{ref}^5}{5} \right)}_{a_6} \cdot \frac{1}{T}\end{aligned}$$

F. Výpočet entropie

Odvození entropie z polynomického tvaru podle Cantery:

$$\frac{S}{R} = a_1 \cdot \ln T + a_2 \cdot T + a_3 \cdot \frac{T^2}{2} + a_4 \cdot \frac{T^3}{3} + a_5 \cdot \frac{T^4}{4} + a_7$$

$$s = \int_0^T \frac{Ra_1}{T} dT + \int_0^T Ra_2 dT + \int_0^T Ra_3 \cdot T dT + \int_0^T Ra_4 \cdot T^2 dT + \int_0^T Ra_5 \cdot T^3 dT - \\ - \int_0^{T_{ref}} \frac{Ra_1}{T} dT + \int_0^{T_{ref}} Ra_2 dT + \int_0^{T_{ref}} Ra_3 \cdot T dT + \int_0^{T_{ref}} Ra_4 \cdot T^2 dT + \int_0^{T_{ref}} Ra_5 \cdot T^3 dT$$

$$s = [Ra_1 \cdot \ln T]_0^T + [Ra_2 \cdot T]_0^T + \left[Ra_3 \cdot \frac{T^2}{2} \right]_0^T + \left[Ra_4 \cdot \frac{T^3}{3} \right]_0^T + \left[Ra_5 \cdot \frac{T^4}{4} \right]_0^T - \\ - [Ra_1 \cdot \ln T]_0^{T_{ref}} + [Ra_2 \cdot T]_0^{T_{ref}} + \left[Ra_3 \cdot \frac{T^2}{2} \right]_0^{T_{ref}} + \left[Ra_4 \cdot \frac{T^3}{3} \right]_0^{T_{ref}} + \left[Ra_5 \cdot \frac{T^4}{4} \right]_0^{T_{ref}} \\ = Ra_1 \cdot \ln T - Ra_1 \cdot \ln 0 + Ra_2 \cdot T - Ra_2 \cdot 0 + Ra_3 \cdot \frac{T^2}{2} - Ra_3 \cdot 0 + \\ + Ra_4 \cdot \frac{T^3}{3} - Ra_4 \cdot 0 + Ra_5 \cdot \frac{T^4}{4} - Ra_5 \cdot 0 = \\ = Ra_1 \cdot \ln T + Ra_2 \cdot T + Ra_3 \cdot \frac{T^2}{2} + Ra_4 \cdot \frac{T^3}{3} + Ra_5 \cdot \frac{T^4}{4}$$

G. Definování O₂

veličina	jednotka	hodnota
q	[W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	Kinetic theory (kinetická teorie)
v	[mm ² .s ⁻¹]	Kinetic theory (kinetická teorie)
M	[kg.kmol ⁻¹]	31,9988
h	[J.kmol ⁻¹]	0
s	[J.kmol ⁻¹ .K ⁻¹]	205 026,9
T	[K]	298,15
L-J lenght	[°A]	3,458
L-J energy	[K]	107,4

tab. 5 Definování O₂

c _p [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]		
Koeficient	ΔT ₁ = 300-1000	ΔT ₂ = 1000-5000
a ₁	981.1887847	851.5073295
a ₂	-0.777368374	0.384720595
a ₃	0.002554441	-0.00019662
a ₄	-2.51138E-06	5.43377E-08
a ₅	8.4144E-10	-5.62177E-12

tab. 6 Polynomické koeficienty c_p pro O₂

H. Definování CO₂

veličina	jednotka	hodnota
q	[W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	Kinetic theory (kinetická teorie)
v	[mm ² .s ⁻¹]	Kinetic theory (kinetická teorie)
M	[kg.kmol ⁻¹]	44,00995
h	[J.kmol ⁻¹]	-3,935324.10 ⁸
s	[J.kmol ⁻¹ .K ⁻¹]	213 720,2
T	[K]	298,15
L-J lenght	[°A]	3,941
L-J energy	[K]	195,2

tab. 7 Definování CO₂

c _p [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]		
Koeficient	ΔT ₁ = 300-1000	ΔT ₂ = 1000-5000
a ₁	4.44625E+02	7.27742E+02
a ₂	1.69502E+00	8.32808E-01
a ₃	-1.34392E-03	-4.17843E-04
a ₄	4.63947E-07	9.87608E-08
a ₅	-2.71101E-11	-8.90626E-12

tab. 8 Polynomické koeficienty c_p pro CO₂

I. Definování H₂O

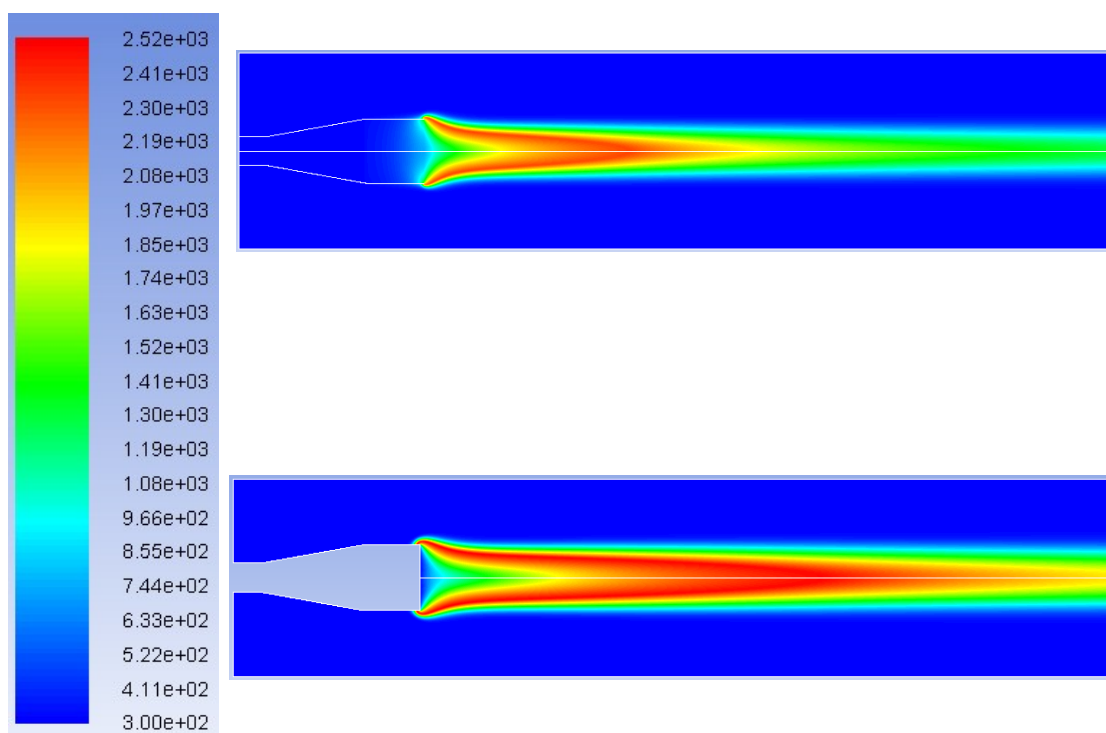
veličina	jednotka	hodnota
q	[W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	Kinetic theory (kinetická teorie)
v	[m ² .s ⁻¹]	Kinetic theory (kinetická teorie)
M	[kg.kmol ⁻¹]	18,01534
h	[J.kmol ⁻¹]	-3,92869.10 ⁸
s	[J.kmol ⁻¹ .K ⁻¹]	188 522
T	[K]	298,15
L-J lenght	[°A]	2,605
L-J energy	[K]	572,4

tab. 9 Definování H₂O

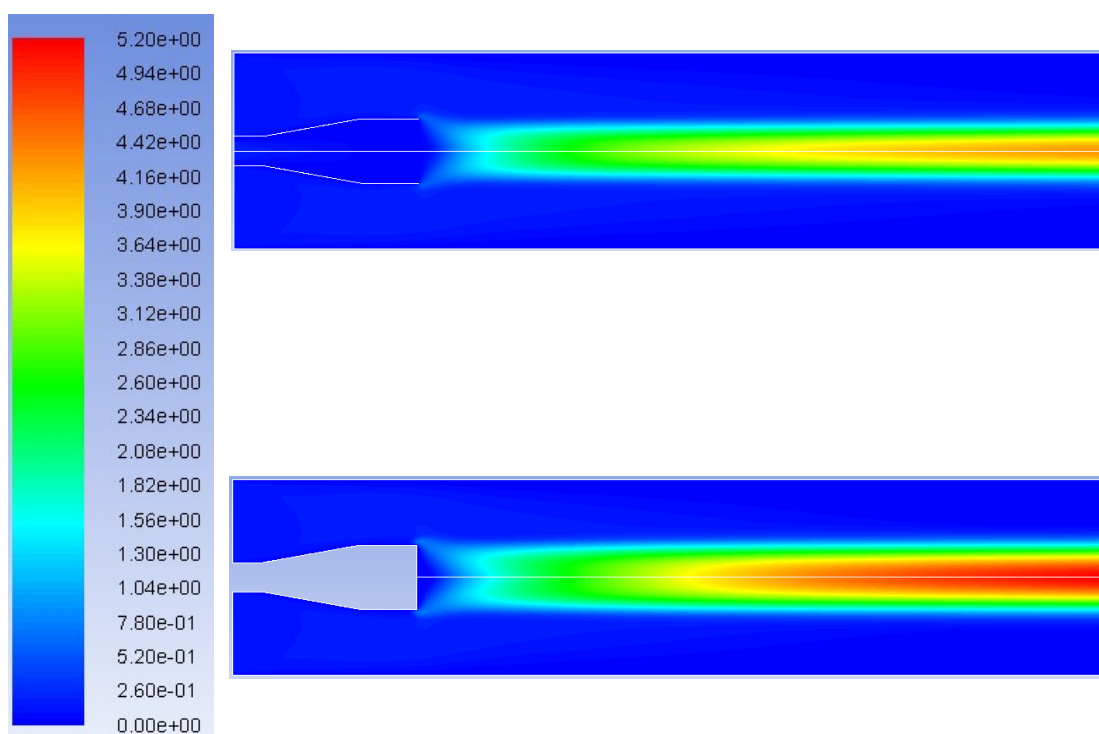
c _p [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]		
Koeficient	ΔT ₁ = 300-1000	ΔT ₂ = 1000-5000
a ₁	1.93627E+03	1.39917E+03
a ₂	-9.39132E-01	1.00392E+00
a ₃	3.00698E-03	-7.56645E-05
a ₄	-2.53086E-06	-4.47523E-08
a ₅	8.17174E-10	7.75684E-12

tab. 10 Polynomické koeficienty c_p pro H₂O

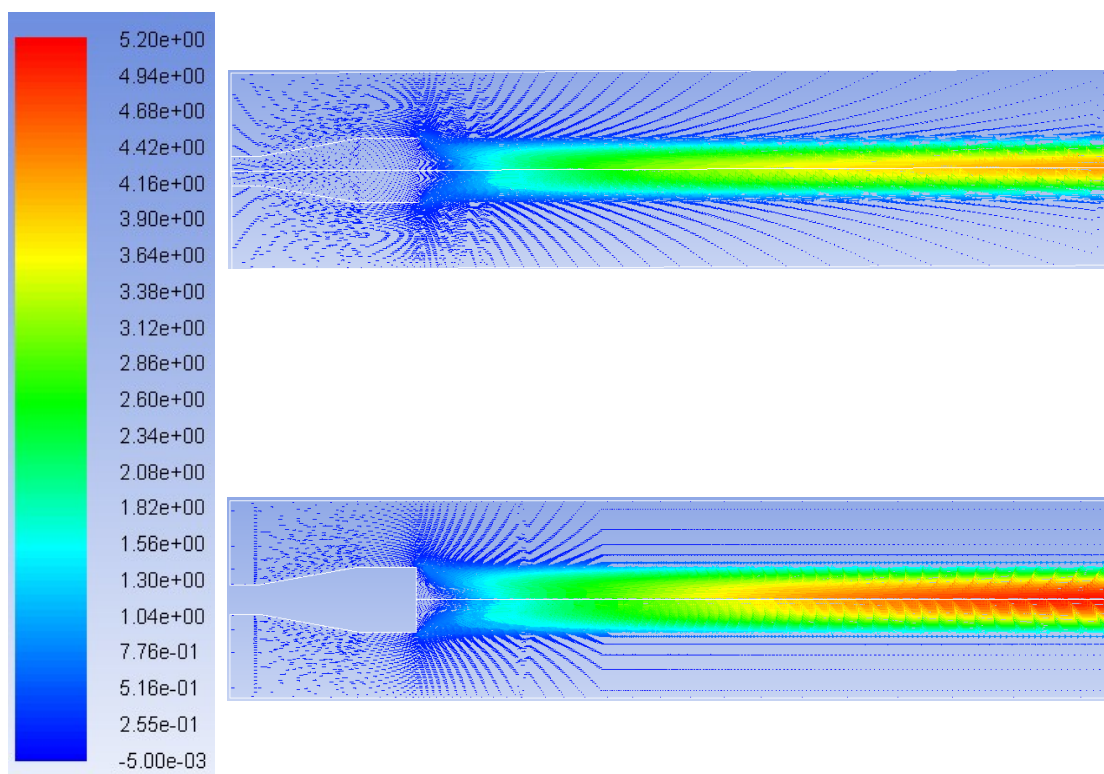
J. Výsledky jednorovnicového chemismu PS



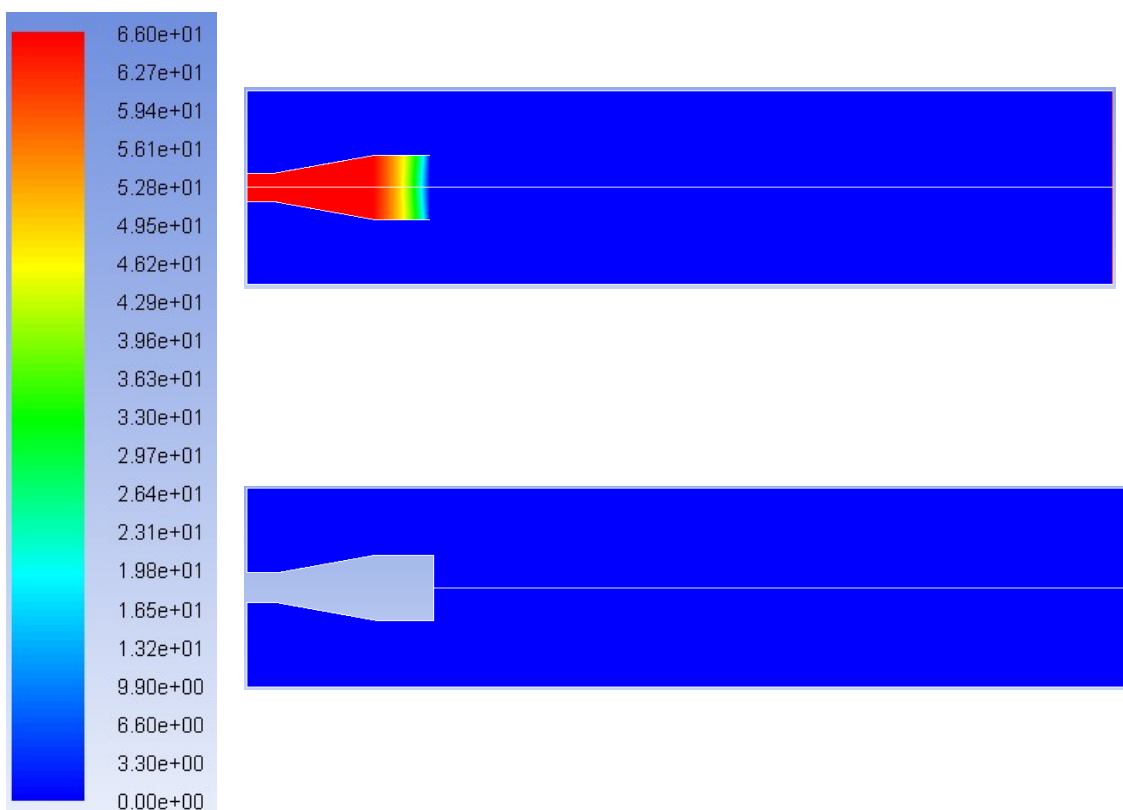
obr. 24 Kontury teplot [K]



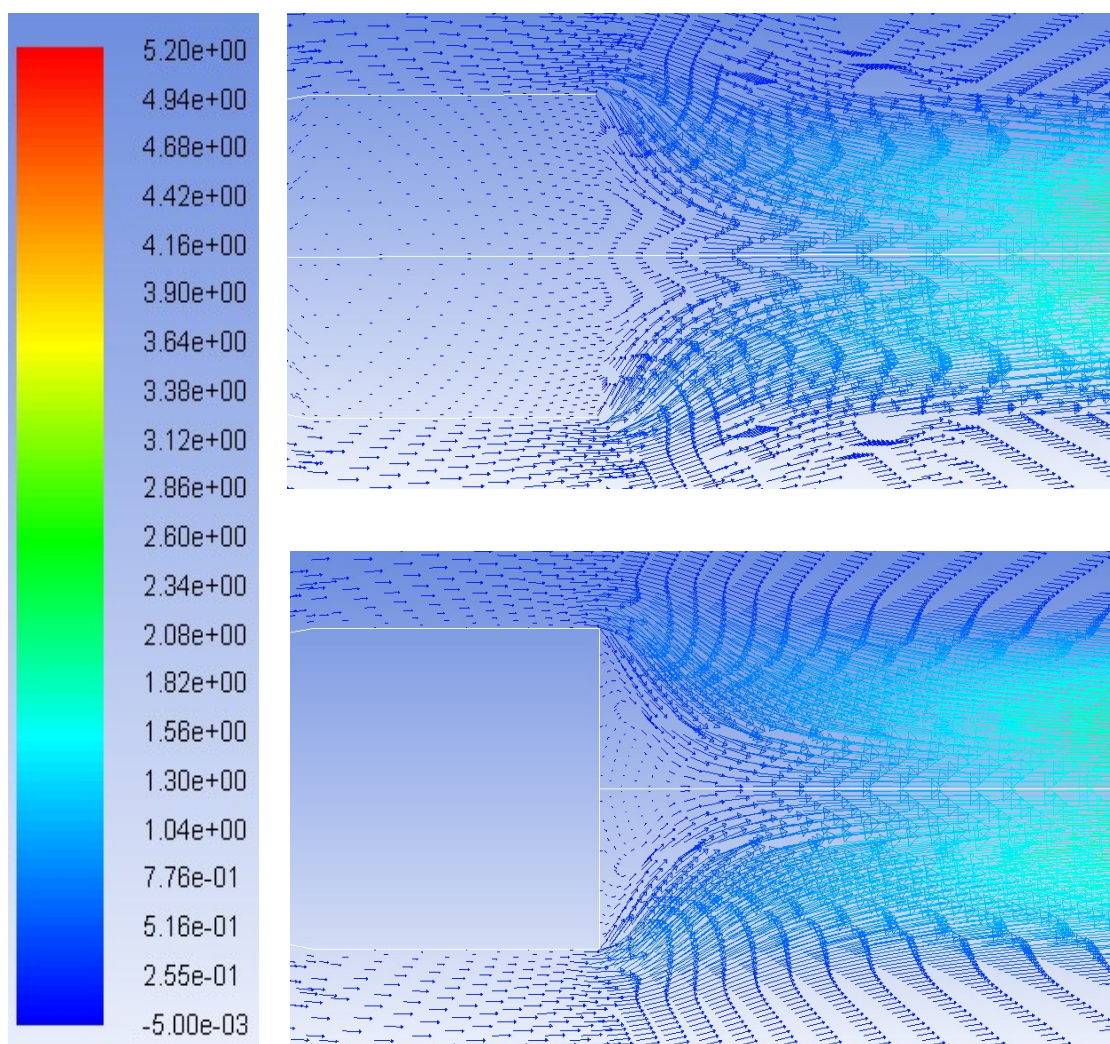
obr. 25 Kontury rychlostí [m/s]



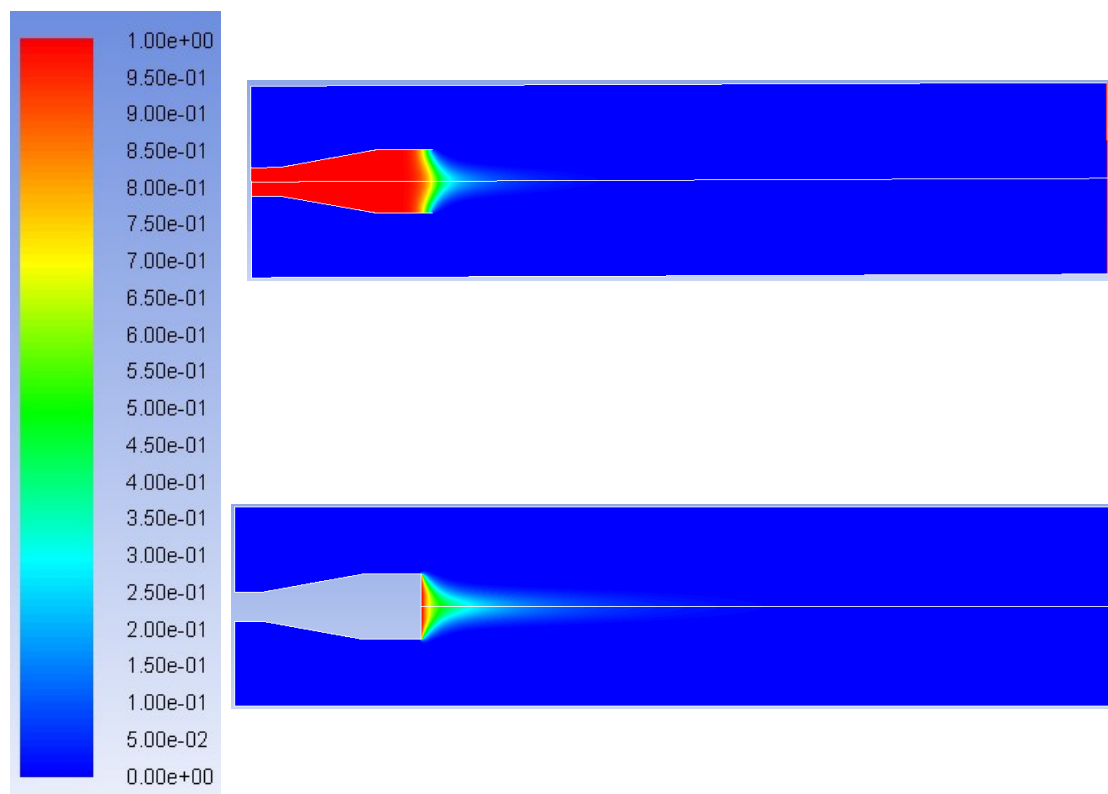
obr. 26 Vektory rychlostí [m/s]



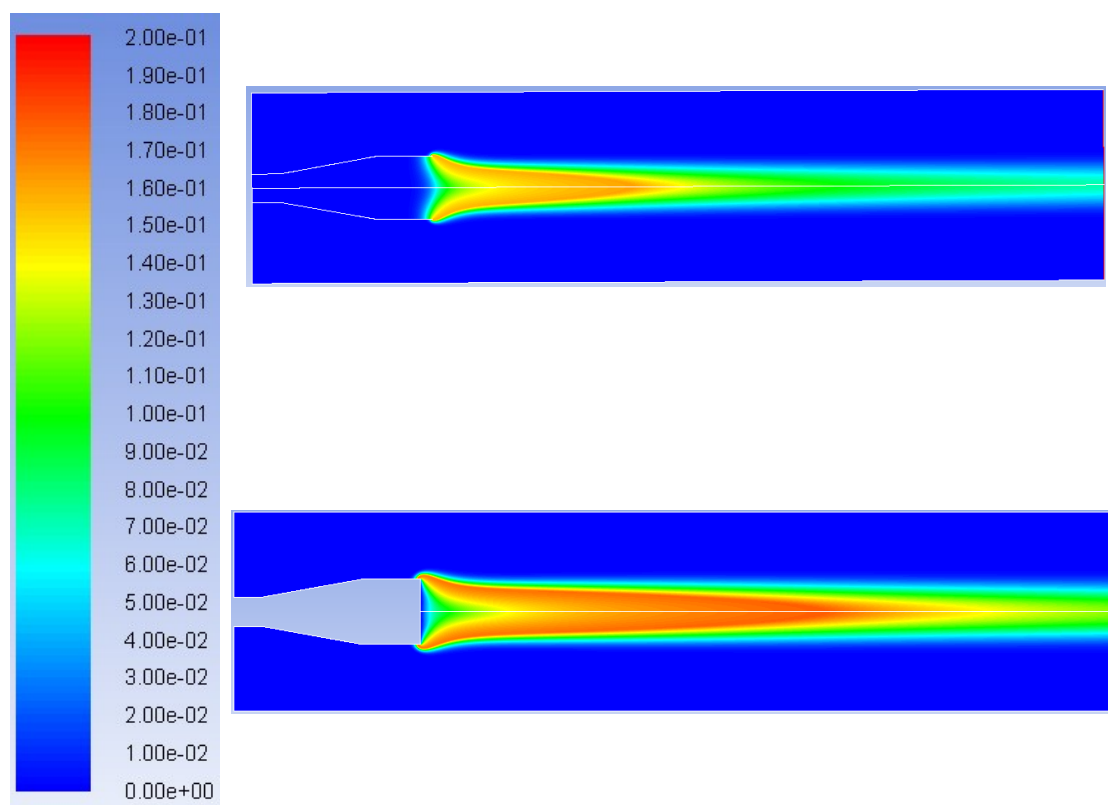
obr. 27 Kontury tlaků [Pa]



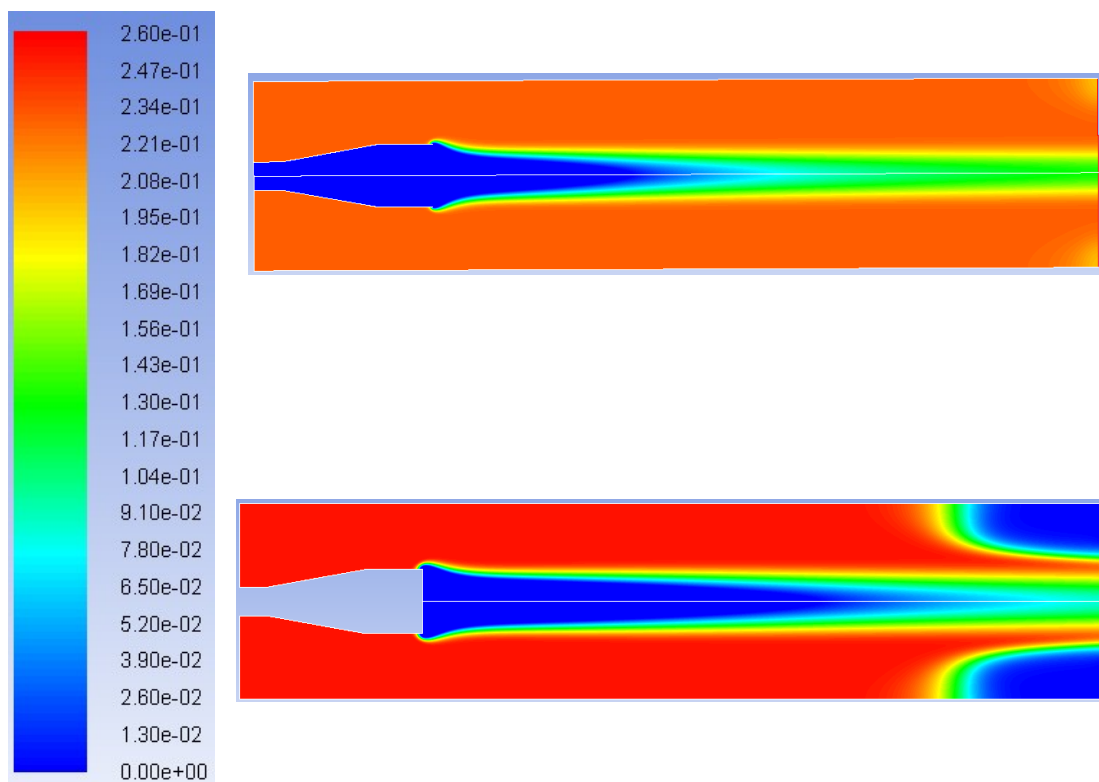
obr. 28 Detail vektorů rychlostí na výstupu z pohárku [m/s]



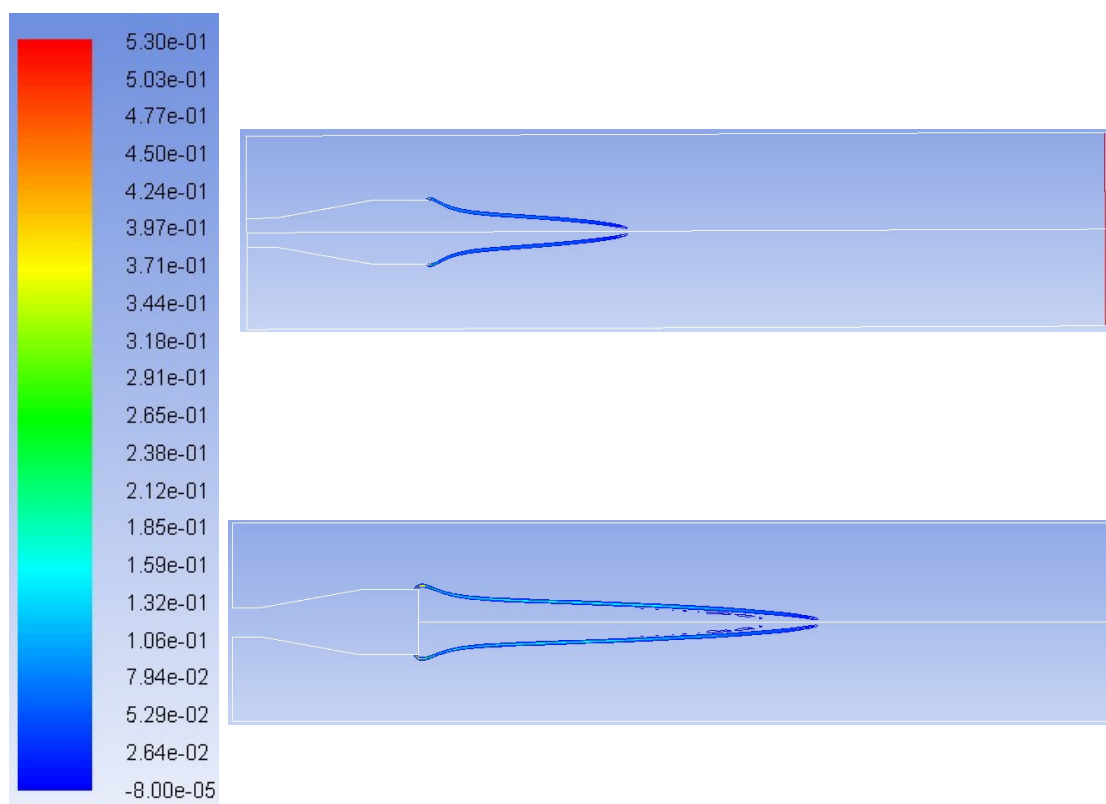
obr. 29 Hmotnostní podíl CH_4 [1]



obr. 30 Hmotnostní podíl CO_2 [1]

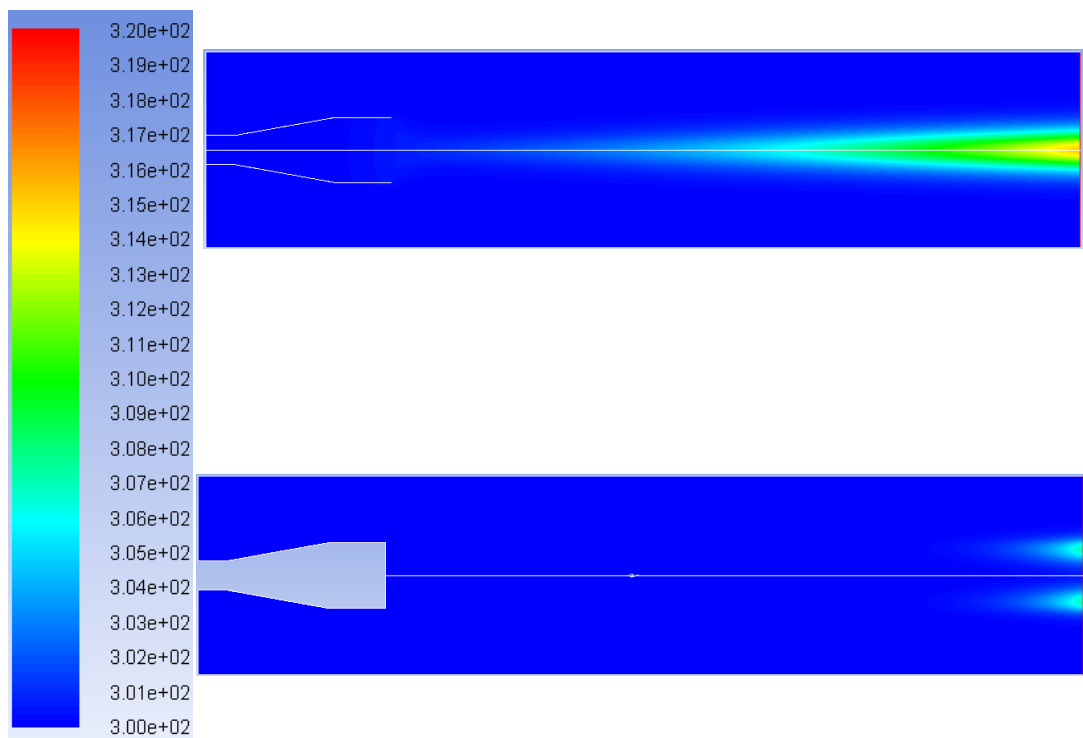


obr. 31 Hmotnostní podíl O_2 [1]

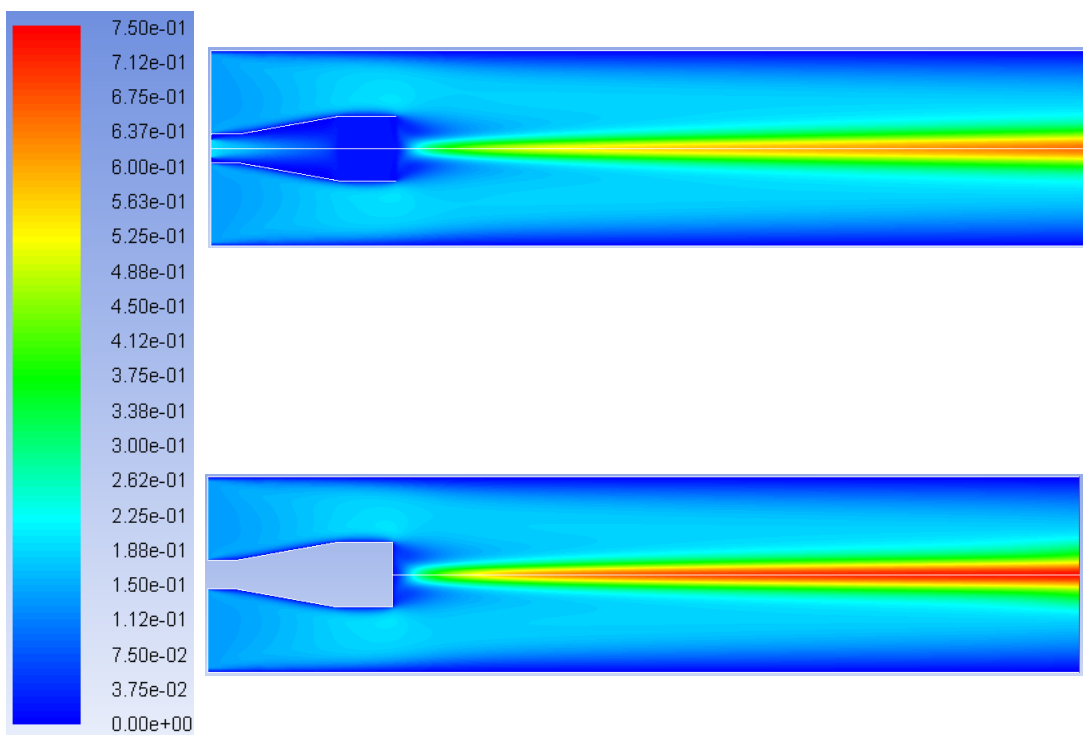


obr. 32 Teplo vznikající z reakce [W]

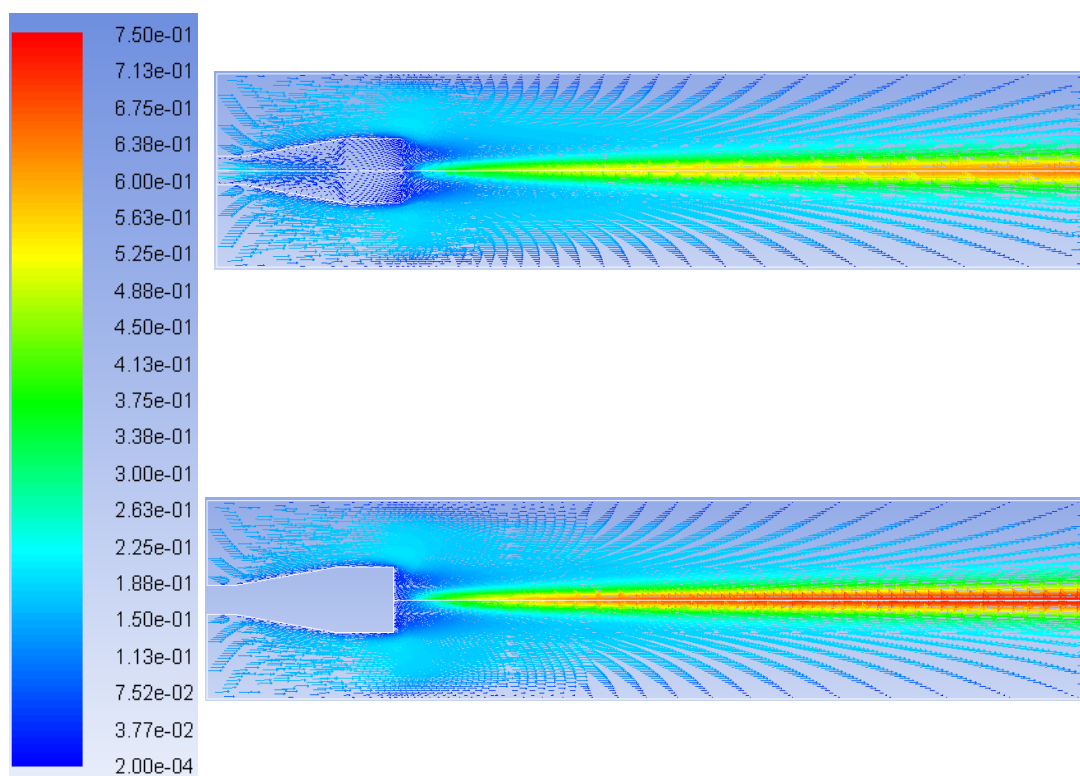
K. Výsledky dvou-rovnicového chemismu CM



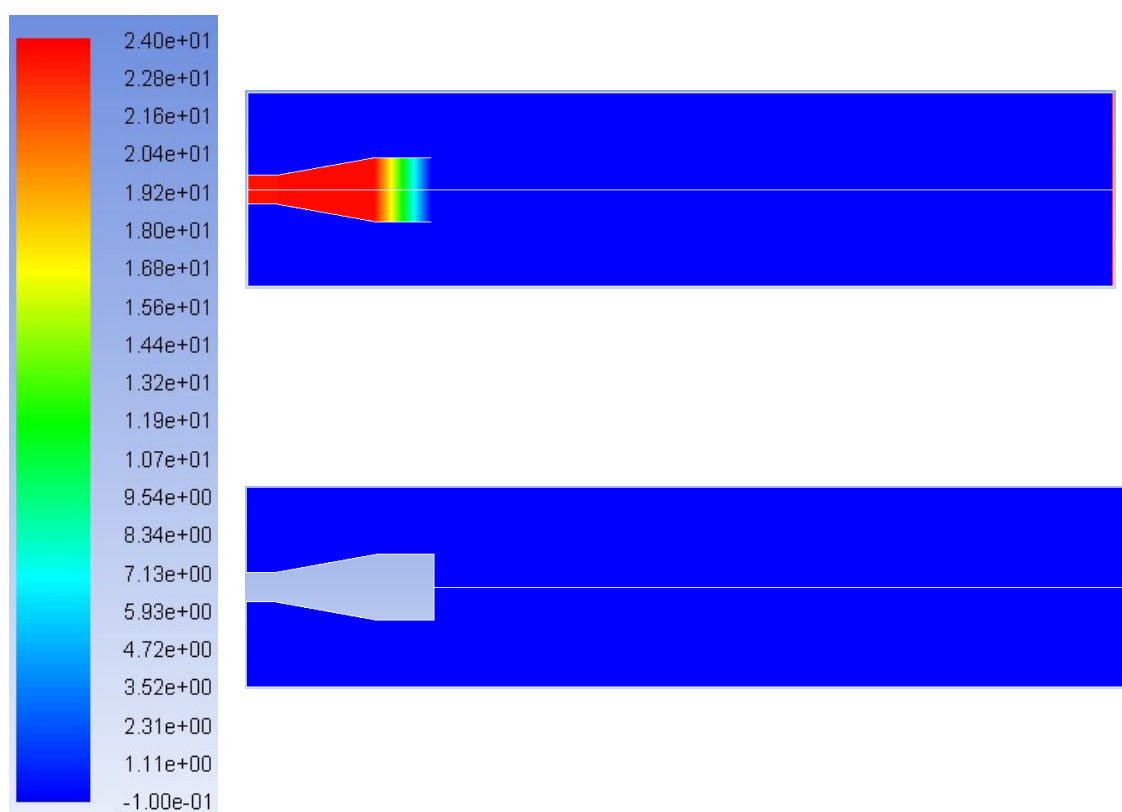
obr. 33 Kontury teplot [K]



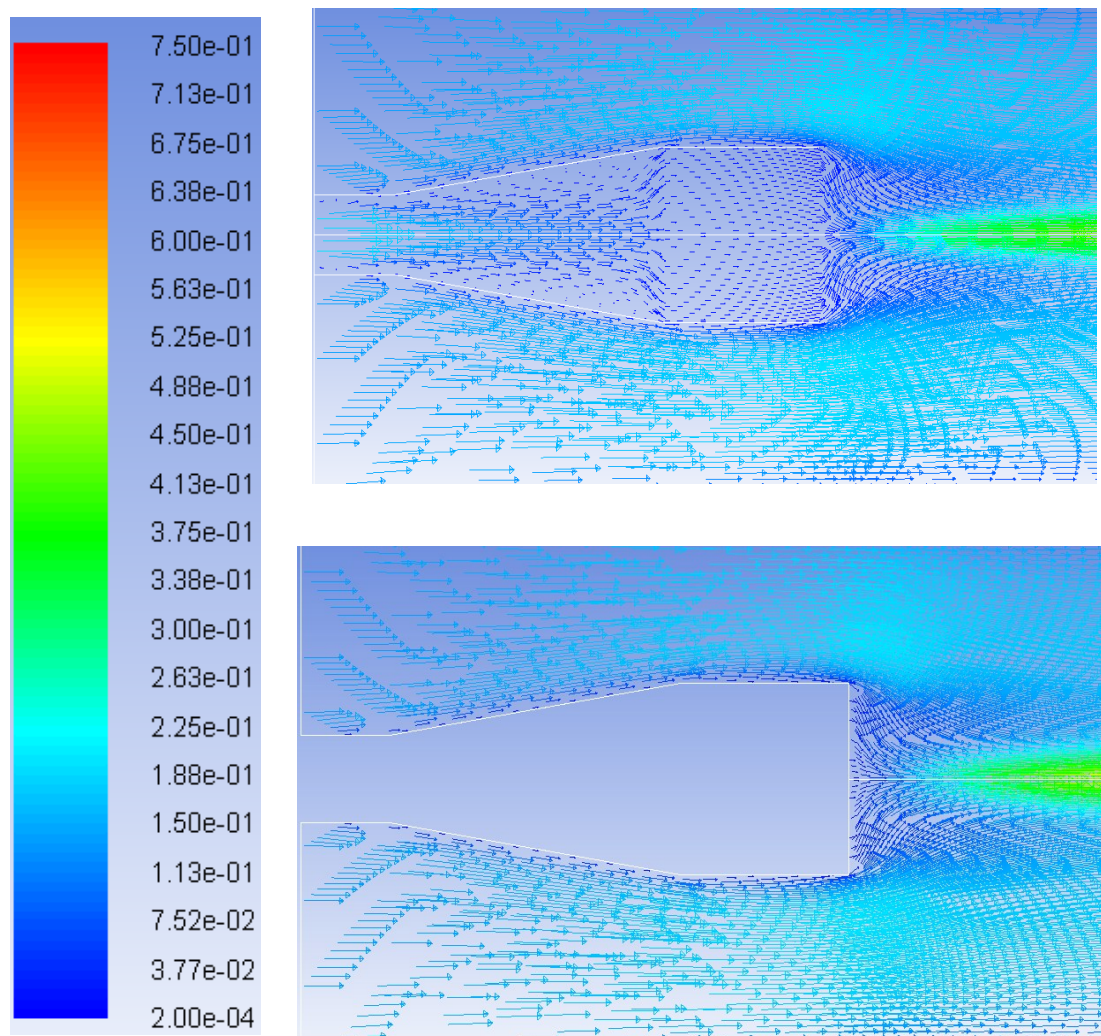
obr. 34 Kontury rychlostí [m/s]



obr. 35 Vektory rychlostí [m/s]

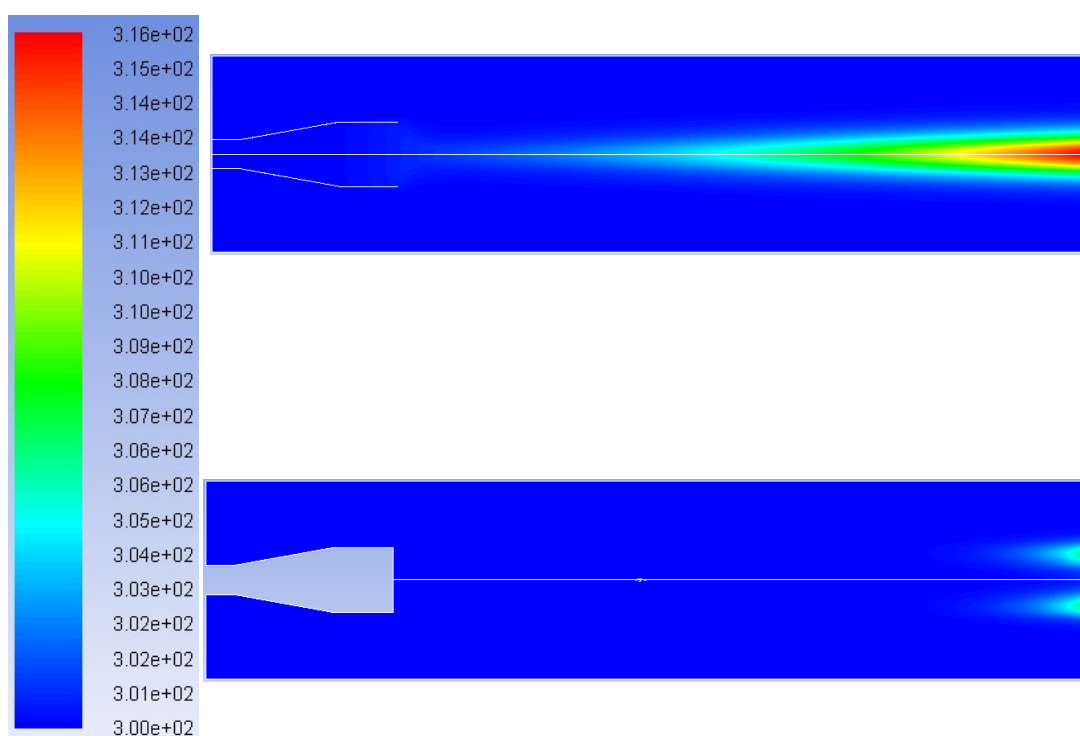


obr. 36 Kontury tlaků [Pa]

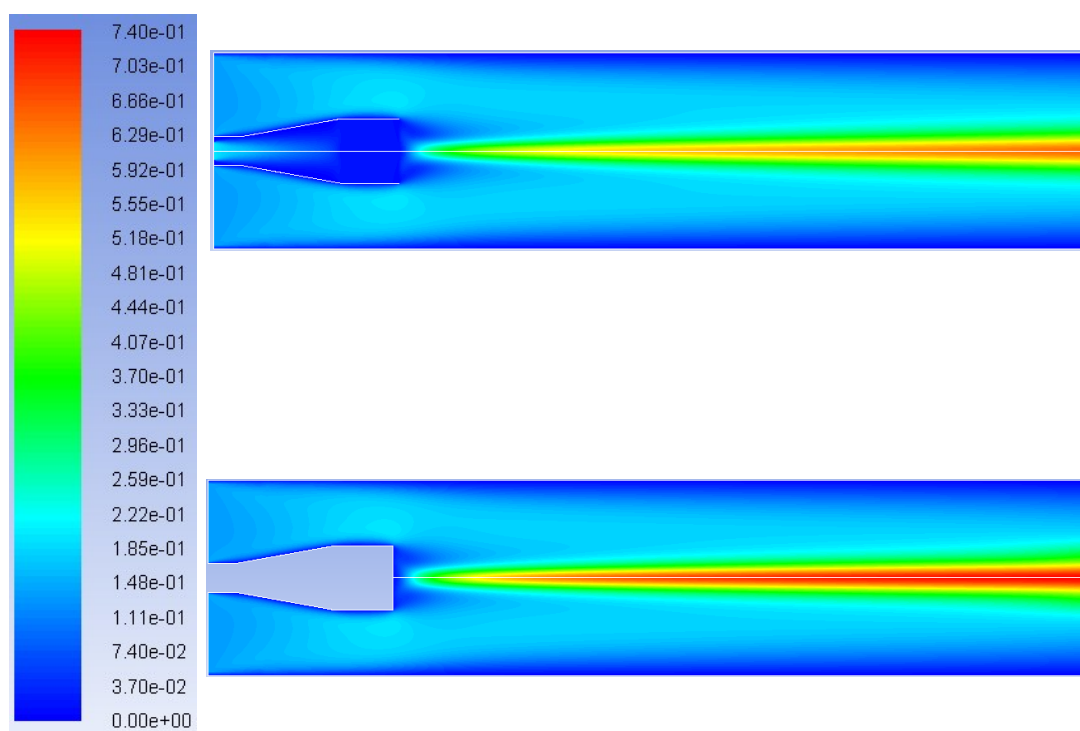


obr. 37 Detail vektorů rychlostí na výstupu z pohárku [m/s]

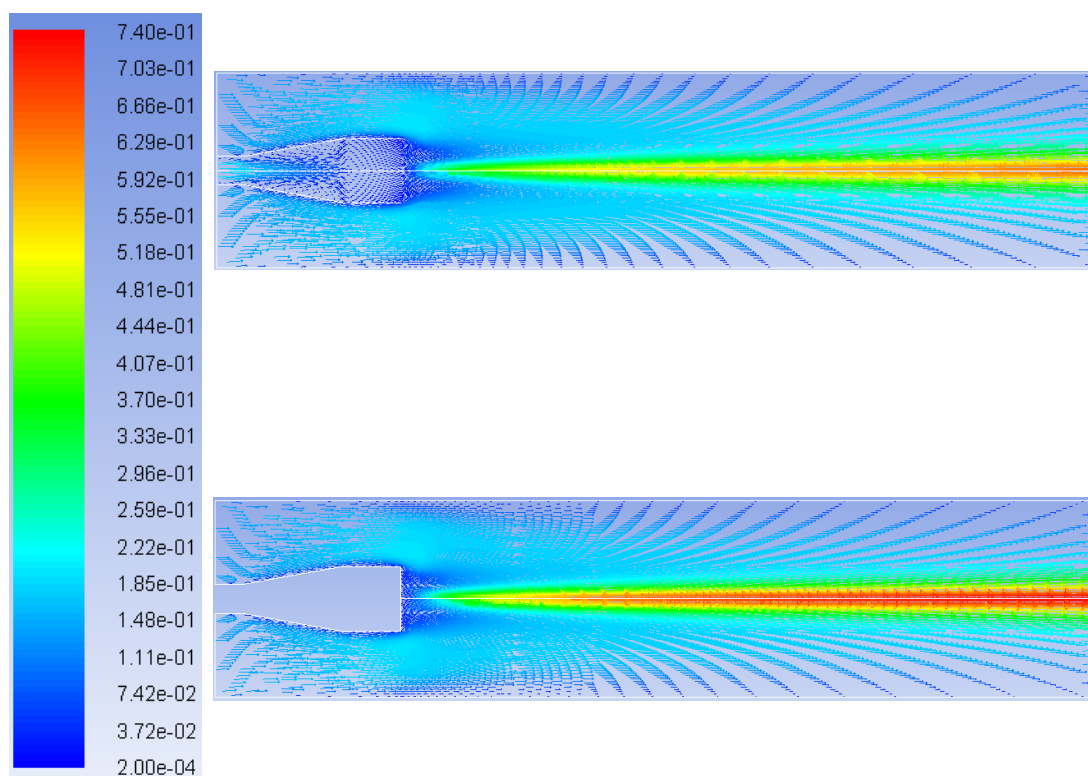
L. Výsledky dvou-rovnicového chemismu WD



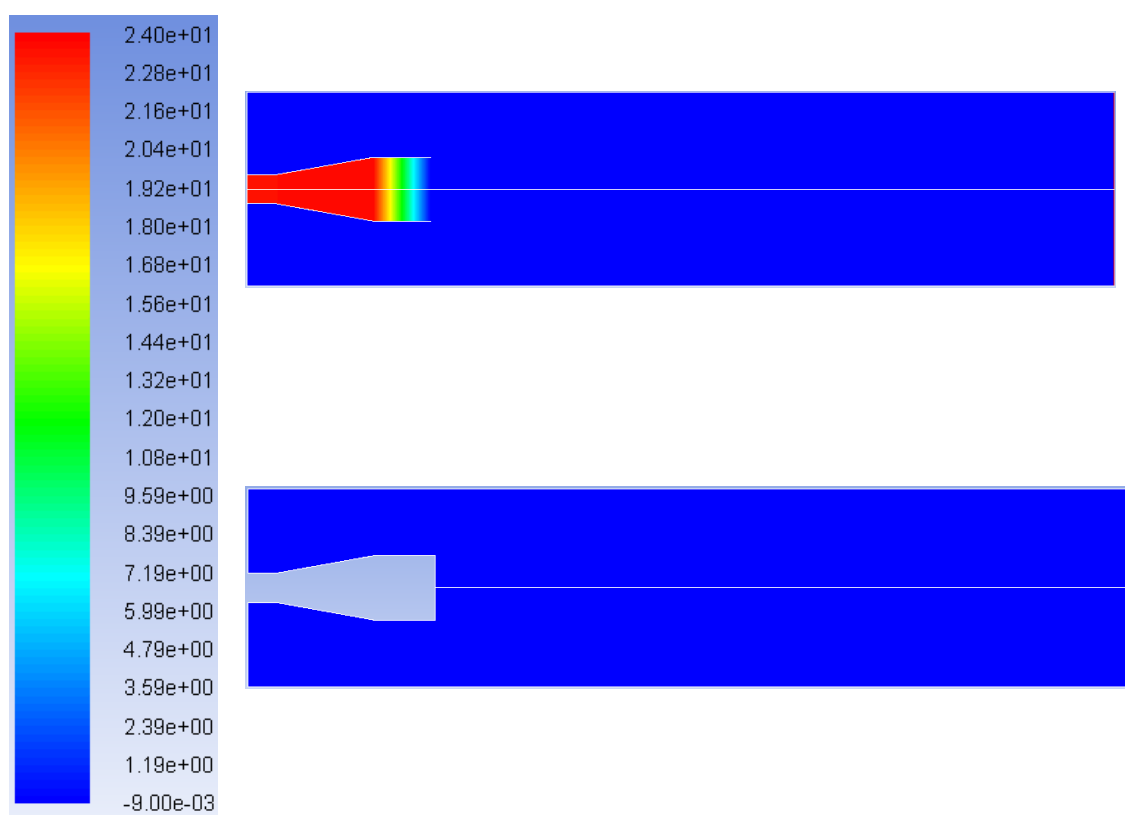
obr. 38 Kontury teplot [K]



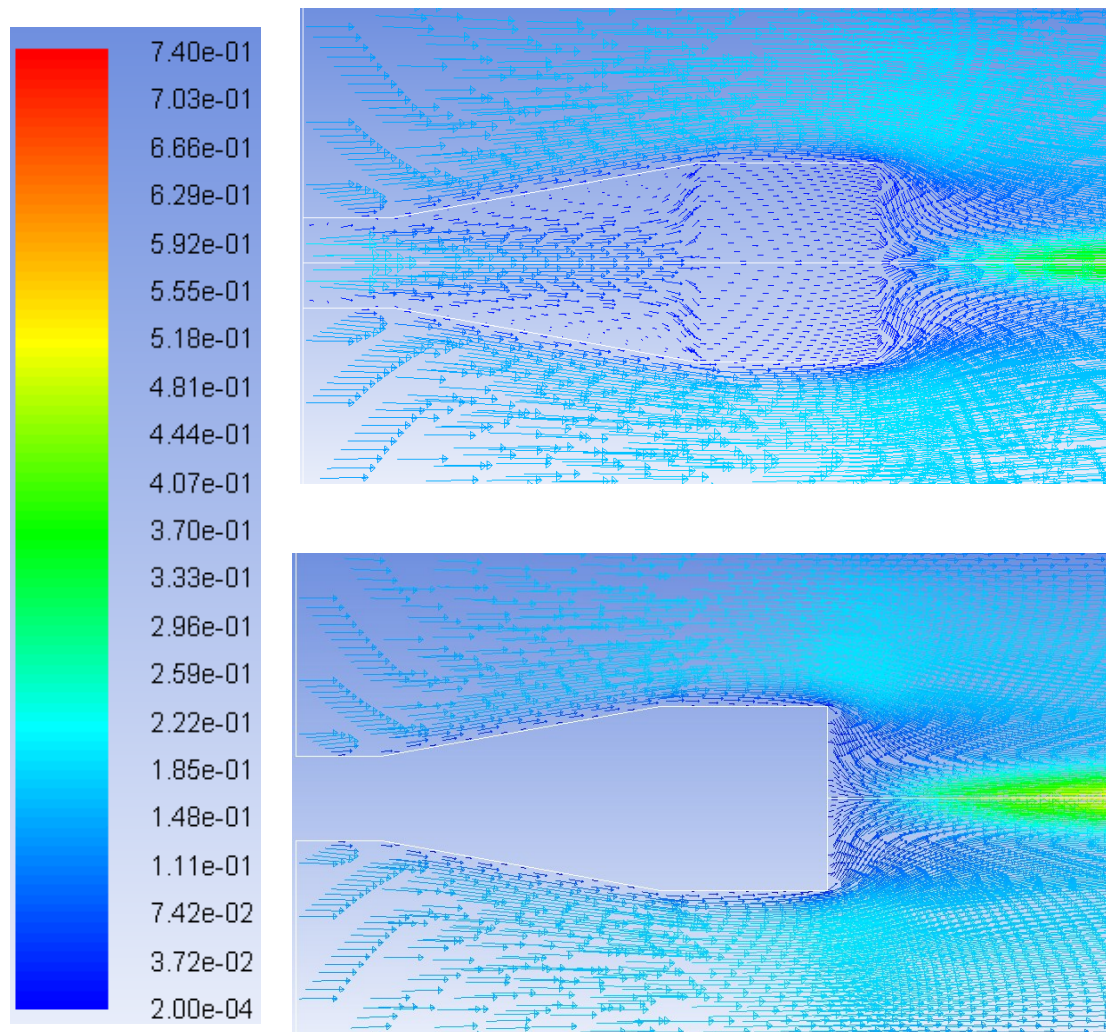
obr. 39 Kontury rychlostí [m/s]



obr. 40 Vektory rychlostí [m/s]



obr. 41 Kontury tlaků [Pa]



obr. 42 Detail vektorů rychlostí na výstupu z pohárku [m/s]